

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO
CENTRO TECNOLÓGICO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL

PEDRO HENRIQUE BONFIM PANTOJA

**UMA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DIFUSÃO-ADVECÇÃO COM O TERMO
CONTRAGRADIENTE**

VITÓRIA
2014

PEDRO HENRIQUE BONFIM PANTOJA

**UMA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DIFUSÃO-ADVECÇÃO COM O TERMO
CONTRAGRADIENTE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração Modelagem Matemática de Processos Atmosféricos.

Professor Orientador: Prof. Drº Davidson
Martins Moreira

VITÓRIA

2014

PEDRO HENRIQUE BONFIM PANTOJA

**UMA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DIFUSÃO-ADVECÇÃO COM O TERMO
CONTRAGRADIENTE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental do Centro Tecnológico da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Ambiental, na área de concentração Modelagem Matemática de Processos Atmosféricos.

Professor Orientador: Prof. Drº Davidson
Martins Moreira

Vitória, ____ de _____ de 2014.

Orientador: Prof. Drº Davidson Martins Moreira

Examinador Interno: Prof. Drº Valdério Anselmo Reisen

Examinador Externo: Prof. Drº Antônio Gledson Oliveira Goulart

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, pela dádiva da vida e pela perseverança; Agradeço ao Prof. Dr. Davidson Martins Moreira, pela orientação, apoio, incentivo e dedicação durante o desenvolvimento deste trabalho; Agradeço à minha colega de curso Maria de Fátima Silva Leite; Agradeço à minha família, especialmente aos meus pais e irmãos, pelo incentivo, carinho e compreensão demonstrados durante toda trajetória de estudos; Agradeço aos professores do PPGEA, pela colaboração em minha formação; Agradeço a CAPES, pelo suporte financeiro; Agradeço ao PPGEA, pela oportunidade.

“Se enxerguei mais longe, foi porque me
apoiei sobre os ombros do gigante”.

Isaac Newton

RESUMO

Neste trabalho, apresenta-se uma solução para equação de difusão-advecção considerando o termo contragradiente que é um termo adicional. Esse termo adicional contém informações sobre a assimetria, escala de tempo Lagrangeana e velocidade turbulenta vertical. A solução da equação foi obtida pela utilização da técnica de Transformada de Laplace, considerando a Camada Limite Planetária (CLP) como um sistema de multicamadas. Os parâmetros turbulentos foram derivados da teoria de difusão estatística de Taylor, combinada com a teoria da similaridade. Assim, são apresentadas simulações para diferentes valores de assimetria, o que propiciou a obtenção de uma concentração de contaminantes em diferentes alturas, em uma camada limite convectiva. A avaliação do desempenho do modelo, considerando a assimetria no processo de dispersão de poluentes atmosféricos, foi realizada através de um experimento de tanque convectivo tradicional. Nesse experimento, o termo contragradiente influenciou a concentração de poluentes para uma camada limite convectiva. Entretanto, com as parametrizações utilizadas, o modelo não conseguiu captar de forma eficiente o comportamento da concentração em pontos mais distantes da fonte.

Palavras-chave: Camada Limite Convectiva. Assimetria. Experimento de Tanque.

ABSTRACT

In this paper presents a solution to the advection-diffusion equation considering the term is an additional term countergradient. This additional term contains information asymmetry, Lagrangian time scale and vertical turbulent velocity. The solution of the equation was obtained by using the technique of Laplace transform, considering the planetary boundary layer (PBL) as a multilayer system. The turbulent parameters were derived from statistical distribution theory Taylor, combined with the theory of similarity. Hence, Simulations for different values of asymmetry, which allowed to obtain a concentration of contaminants at different heights in a convective boundary layer is displayed. The evaluation of model performance, considering the asymmetry in the dispersion of air pollutants process was conducted through an experiment of traditional convective tank. In this experiment, the countergradient influenced the concentration of pollutants in a convective boundary layer. However, with the parameterizations used, the model failed to capture efficiently the behavior of concentration at points further away from the source.

Keywords: Convective Boundary Layer. Asymmetry. Tank experiment.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Divisão da troposfera.....	26
Figura 2 – Evolução diária da CLP.....	28
Figura 3 – Variação da temperatura potencial e velocidade média do vento com altura na CLC.....	30
Figura 4 – Curva simétrica	33
Figura 5 – Curva assimétrica	33
Figura 6 – Curva assimétrica negativa	34
Figura 7 – Efeito local e não local na dispersão de poluentes.....	36
Figura 8 – Desenho esquemático do modelo.....	37
Figura 9 – Fotografia do tanque de convecção.....	52

LISTA DE GRÁFICOS

Gráfico 1 – Gráfico da concentração superficial adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$), em função da distância adimensional ($x = Xw_*/Uz_i$) para diferentes valores de Assimetria, comparados com experimento de Tanque.....	58
Gráfico 2 – Gráfico da concentração adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$), em função da posição adimensional ($x = Xw_*/Uz_i$) para diferentes valores de assimetria em $z = 1100m$	59
Gráfico 3 – Gráficos da concentração superficial adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$), em função da posição adimensional ($x = Xw_*/Uz_i$) para diferentes pontos da quadratura de G, em que $z = 5m$	62
Gráfico 4 – Gráfico da concentração superficial adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$) em função da distância adimensional ($x = Xw_*/Uz_i$) para os coeficientes de difusão em $z = 5m$ e $Sw = 0$ comparados com experimento de Tanque.....	64
Gráfico 5 – Gráfico de espalhamento dos dados observados (C_o) no experimento de tanque em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p).....	65
Gráfico 6 – Gráfico da concentração adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$) em função da distância da fonte ($x = Xw_*/Uz_i$) para $z = 1100m$ e $x = 5500m$	67

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Escala da assimetria.....	33
Tabela 2 – Valor da concentração de contaminantes no nível do solo.....	50
Tabela 3 – Dados de entrada do modelo.....	50
Tabela 4 – Valores de concentrações superficiais para o experimento de tanque e para o modelo com $K=4$ e com diferentes valores de assimetria.....	57
Tabela 5 – Valores de concentrações para o modelo com diferentes valores de assimetria com $z=1100$ m.....	59
Tabela 6 – Valores de concentrações superficiais para o experimento de tanque e para o modelo com $K=8$ e diferentes valores de assimetria.....	60
Tabela 7 – Valores de concentrações para $K=4$ e $K=8$ para diferentes valores.....	61
Tabela 8 – Valores das concentrações superficiais para os experimento de tanque e para o modelo com $K=8$ e $S_w=0$	63
Tabela 9 – Valores de concentrações para diferentes coeficientes de difusão em $S_w=0$ e $z=1100$ m.....	66

LISTA DE SIGLAS

- A_n e B_n : Constantes de integração
- ADMM: Advection Diffusion Multilayer Model
- C: Concentração média
- C_n : Concentração média no subintervalo n
- C^* : Concentração média adimensional
- CLC: Camada Limite Convectiva
- CLE: Camada Limite Estável
- CLN: Camada Limite Noturna
- CLP: Camada Limite Planetária
- CLR: Camada Limite Residual
- CLS: Camada Limite Superficial
- C_o : Concentrações observadas
- C_p : Concentrações previstas
- $\overline{C_n}$: Concentração na n -ésima subcamada
- $\overline{C_{np}}$: Solução particular
- $\overline{C_{nh}}$: Solução homogênea
- $(f_m^*)_i$: Frequência adimensional do pico espectral vertical
- $F_i^E(n)$: Espectro Euleriano de energia
- $F_i^E(0)$: Espectro Euleriano de energia em $n=0$
- g : Aceleração da gravidade, em metros por segundo
- $g(z, t)$: Função de Green
- H_s : Altura da fonte, em metros
- K : Constante de Von Kármán
- K_x : Coeficiente de difusão turbulenta na direção x
- K_z : Coeficiente de difusão turbulenta na direção z
- K_{zn} : Coeficiente de difusão turbulenta na região n
- L : Comprimento de Monin-Obukov(m)
- \mathcal{L} : Transformada de Laplace
- n : Frequência(s)
- n^* : Indica região onde ocorre a emissão
- N : Número de camadas

N_i : Número de inversões

p_i : Termo tabelado da Quadratura de Gauss (raízes)

Q : Intensidade da fonte (g/s)

$S_i^E(n)$: Espectro de velocidade Euleriana

S_k : Assimetria

$S_{p_n^*}$: Solução particular aplicada a região de emissão

$S'_{p_n^*}$: Derivada da solução particular aplicada a região de emissão

T_{Lw} : Escala de tempo Langrageana

t : Tempo (s)

u_* : Velocidade de fricção (m/s)

u : Velocidade média do vento (m/s)

u_n : Velocidade média do vento na região n (m/s)

u : Componente do vento médio na direção x

v : Componente do vento médio na direção y

w : Componente do vento médio na direção z

w_i : Termo tabelado da quadratura de Gauss (pesos)

w_* : Escalada da velocidade convectiva

W : Wronskiano

$\overline{w'c'}$: Fluxo turbulento de poluentes na vertical

$(\overline{w\theta})_0$: Fluxo de calor turbulento na superfície

X : Distância longitudinal da fonte adimensional

x : Distância longitudinal da fonte

z : Altura acima da superfície (m)

z_i : Altura da Camada Limite Convectiva (m)

LISTA DE CARACTERES GREGOS

δ : Função generalizada de Delta de Dirac

$(\lambda_m)_w$: Comprimento de onda associado ao máximo espectro vertical

Ψ : Taxa de dissipação

Ψ_m : Função estabilidade

σ_w : Velocidade turbulenta vertical

σ_i : Desvio padrão Euleriano da velocidade do vento turbulento

σ_i^2 : Variância generalizada

Θ : Temperatura potencial

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	15
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	17
3 OBJETIVOS.....	24
3.1 Objetivo Geral.....	24
3.2 Objetivos Específicos.....	24
4 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA.....	25
4.1 Características da camada limite convectiva (CLC).....	29
4.2 Fechamento local e não-local.....	31
5 METODOLOGIA.....	36
5.1 Solução homogênea.....	40
5.2 Solução particular.....	40
5.3 Solução geral.....	42
5.4 Inversão da solução.....	45
6 DADOS DO EXPERIMENTO.....	48
7 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA.....	51
7.1 Coeficientes de Difusão.....	52
7.1.1 Coeficiente de difusão de Degrazia (1997).....	52
7.1.2 Coeficiente de difusão de Degrazia (2001).....	52
7.1.3 Coeficiente de difusão de Pleim (2007).....	54
7.2 Perfil do Vento.....	55
8 RESULTADOS.....	56
8.1 Resultados das simulações coeficiente de Degrazia (1997).....	57
8.1.2 Comparação entre coeficientes de Degrazia (1997 e 2001) e Pleim (2007).....	63
9 CONCLUSÃO.....	68
10 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	70

1 INTRODUÇÃO

Desde a primeira metade do século XX, a poluição do ar tem sido um grave problema nos grandes centros urbanos, sendo motivado pela presença - cada vez maior - dos veículos automotores acrescida pela atividade industrial que é uma das principais fontes poluidoras. Os problemas ocasionados pela poluição do ar afetam os processos naturais e, assim, influenciam o equilíbrio ecológico. Diante disso, diferentes grupos de pesquisa vêm trabalhando na simulação computacional e simulação atmosférica com intuito de alcançar uma melhor compreensão acerca da dispersão de poluentes na atmosfera, bem como os seus impactos.

Portanto, para que seja possível determinar a concentração de poluentes na atmosfera há dois métodos de investigação: os experimentos de campo ou de laboratório e as simulações computacionais. Pelo fato dos experimentos de campo ser, na maioria das vezes, dificultados por problemas operacionais e por seu alto custo, a simulação computacional se torna o método mais utilizado para a compreensão desses processos. Esses modelos permitem realizar simulações que estimam o campo de poluentes próximo a fonte, possibilitando avaliar o impacto ambiental causado pela fonte poluidora.

Dentre os modelos que podem ser utilizados para simular a dispersão de poluentes na atmosfera, destacam-se dois modelos: Eulerianos e Lagrangeanos, nesses a diferença básica é o sistema de referência. No sistema de referência Euleriano se descreve o comportamento da concentração por meio da relação de um sistema fixo de coordenadas, ao passo que no sistema de referência Lagrangeano as mudanças na concentração são descritas por meio da utilização de coordenadas que se movimentam com o fluido.

Os modelos Eulerianos de dispersão têm como base a solução da equação de difusão-advectação que é expressa através da parametrização dos fluxos turbulentos. Sob certas condições, é possível obter expressões para o campo de concentração que sejam relativas às funções da emissão de poluentes, de variáveis meteorológicas e de parâmetros de dispersão da pluma.

A maneira mais utilizada de solucionar o problema de fechamento da equação de difusão-advectação é baseada na hipótese de transporte por gradiente, 1º Lei da difusividade de Adolf Eugen Fick (1829-1901), que, em analogia com a difusão molecular, assume que o fluxo

turbulento de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média (Fick, 1855).

Entretanto, esse fechamento da turbulência tradicional se torna questionável quando os movimentos convectivos dominam o transporte difusivo, porque desse modo à teoria K não considera o transporte não homogêneo da camada limite convectiva, pois não há caracterização do transporte assimétrico das partículas.

Ao contrário da difusão molecular, a difusão turbulenta é dependente de escalas e, assim quando a nuvem cresce, turbilhões maiores são incorporados ao processo de expansão, disponibilizando uma fração maior de energia cinética turbulenta para a expansão da nuvem. Embora a teoria K possua limites, ela é bastante utilizada em diversas condições atmosféricas pela possibilidade de descrição do transporte difusivo - de forma Euleriana e, os resultados, obtidos por meio da utilização dessa teoria, concordam com os dados experimentais.

Assim, diferentemente do modo tradicional, a utilização de uma equação genérica para difusão turbulenta, considerando que o fluxo somado à sua derivada é proporcional ao gradiente médio da concentração, possibilita acrescentar um termo adicional na equação de difusão-advecção, que é o termo contragradiente. Tal termo adicional da equação leva consigo informações sobre a assimetria, a escala de tempo Langrageana e a escala da velocidade que considera, de uma maneira mais completa, a dispersão na CLC.

Na literatura, é possível encontrar diversas soluções numéricas da equação de difusão-advecção (Nieuwstad e Van Ulden, 1978; Lamb, 1978; Carvalho, 1996), mas a solução analítica para essa equação possui várias vantagens sobre as soluções numéricas. Sendo possível considerar toda a influência dos parâmetros em uma solução analítica, pois essa é expressa explicitamente em uma forma matematicamente fechada, o que facilita demasiadamente a análise sobre os parâmetros.

Apresenta-se, neste trabalho, uma solução bidimensional para a equação de difusão-advecção com o fechamento não-fickiano, ou seja, considerando o efeito do transporte assimétrico no cálculo da concentração de poluentes. As concentrações superficiais de poluentes obtidas pelo modelo, calculadas para diferentes coeficientes de difusão, foram confrontadas com as

concentrações superficiais que foram encontradas no experimento de tanque para uma camada limite convectiva.

Todo o trabalho de dissertação se subdivide em 10 capítulos: No primeiro capítulo, há uma introdução acerca dos assuntos e tópicos levantados neste trabalho. No segundo capítulo, encontra-se a revisão bibliográfica e os motivadores da realização desse trabalho. No terceiro capítulo estão dispostos os objetivos - geral e específicos. A camada limite planetária e as características da camada limite convectiva são descritas no quarto capítulo. Já no quinto capítulo, é descrita a metodologia utilizada no trabalho. No sexto capítulo, estão dispostas as informações referentes ao experimento de tanque. O sétimo capítulo foi elaborado com as descrições da parametrização da turbulência e os coeficientes de difusão utilizados. No oitavo capítulo estão apresentados os resultados das simulações. E, a conclusão e as referências bibliográficas compõem, respectivamente, o nono e décimo capítulos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Os primeiros estudos realizados para encontrar relações empíricas entre difusão atmosférica e fatores meteorológicos foram realizados na década de cinquenta. Esses estudos permitiram realizar medidas simultâneas de concentração, parâmetros de dispersão da pluma e parâmetros meteorológicos, na tentativa de encontrar relações empíricas entre difusão atmosférica e fatores meteorológicos.

Nesse âmbito, o experimento de Praire Grass foi o experimento de campo mais significativo (Barad, 1958). Nesse experimento, os parâmetros de dispersão lateral e vertical foram medidos diretamente ou estimadas a partir de medidas de concentração na superfície. O que permitiu que Pasquill (1961) desenvolvesse um modelo para os parâmetros de dispersão vertical baseado na teoria estatística de Hay e Pasquill (1959) e nos experimentos de Prairie Grass.

Anteriormente a esses experimentos, Roberts (1923) apresentou uma solução bidimensional da equação de difusão-advecção nos casos onde a velocidade média do vento (u) e o coeficiente de difusão vertical (k_z) seguem uma lei de potência em função da altura (z), válida para fontes ao nível do solo. Isto é:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m \quad ; \quad k_z = k_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n \quad (2.1)$$

Onde z_1 é a altura onde u_1 e k_1 são avaliados, e m e n variam entre 0 e 1.

E assim, Monin e Obukhov (1954) sugeriram uma teoria de similaridade válida para camada limite superficial, essa teoria era baseada na suposição que o regime turbulento é descrito por alguns parâmetros-chaves e, com esses parâmetros, era possível construir escalas características de movimento.

Ao assumir a validade do modelo de dispersão Gaussiano, o parâmetro de dispersão vertical foi estimado usando medidas de concentração na superfície. Após algumas modificações, sugeridas por Gifford (1975), Pasquill classificou os parâmetros de dispersão de acordo com o regime de estabilidade e esse foi um modelo muito utilizado em modelos de dispersão.

A partir da década de setenta, as técnicas empregadas em simulação de dispersão turbulenta foram divididas em duas categorias: Na primeira, a dispersão e o campo de concentração são estimados seguindo as partículas localizadas em um campo de velocidades, que são obtidos resolvendo as equações de Navier-Stokes, considerando as condições de contorno apropriadas. Na segunda, sob uma abordagem iniciada por Taylor, considera-se que as trajetórias podem ser geradas diretamente, usando um modelo estocástico para velocidades Lagrangeanas.

Já a teoria da similaridade, na camada bem misturada, foi desenvolvida por Deardorff (1970) e representa através de escalas de movimento - características dessa região. Ao final da década de setenta e início da década de oitenta, nos anos de 1974, 1976, 1978 e 1981, foram realizados experimentos de tanque de Willis e Deardorff que possibilitaram compreender um avanço considerável na difusão turbulenta da camada limite planetária convectiva. Além disso, os experimentos demonstraram que a estrutura da camada limite convectiva não obedece a uma distribuição Gaussiana.

Os primeiros suportes para as observações laboratoriais de Willis e Deardorff, mencionadas anteriormente, foram obtidas a partir de modelos numéricos de Lamb que foram realizados em 1978 e 1982 que resultaram do modelo LES (Large Eddy Simulation) de Deardorff (1972). Após tais resultados, Briggs (1975) propôs uma expressão para a distribuição de concentração vertical, obtida a partir dos resultados de laboratório de Willis e Deardorff, e os pesquisadores Nieuwstadt (1984) e Sorbjan (1989) apresentaram uma teoria de similaridade local que é válida para toda a camada limite planetária estável.

A partir de experimentos e observações, a solução Gaussiana (Fick, 1855) - obtida por Fick - foi considerada a primeira solução da equação de difusão-advecção na qual o coeficiente de difusão e a velocidade do vento são constantes com a altura. Para as seguintes condições de contorno:

$$k_{zn} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0, z_i \quad \text{e} \quad z \rightarrow \infty \quad (2.2)$$

Essas correspondem ao fluxo nulo de contaminantes, na parte inferior e superior da camada limite planetária.

Foi obtida assim, por Rounds (1955), uma solução bidimensional válida para fontes elevadas com o perfil de velocidade média do vento, descrito acima, mas consideraram-se os perfis de k_z lineares.

A equação bidimensional de transporte e difusão foi resolvida por Smith (1957) considerando u e k_z como funções de potência da altura com os expoentes dessas funções, seguindo a lei conjugada de Schmidt ($\alpha = 1 - \beta$). Posteriormente, Smith (1957) apresentou a solução no caso de u constante, mas com k_z da seguinte forma:

$$k_z = k_0 z^\alpha (z_i - z)^\beta \quad (2.3)$$

Nessa, k_0 é uma constante e α e β variam entre 0 e 1, de acordo com a altura da camada limite z_i .

Já Scriven e Fisher (1975) propuseram a solução com u constante e k_z , como segue:

$$k_z = z \quad \text{para} \quad 0 \leq z \leq z_t, \quad (2.4)$$

$$k_z = k_z(z_t) \quad \text{para} \quad z_t \leq z \leq z_i, \quad (2.5)$$

Nessa solução z_t é uma altura predeterminada (geralmente a altura da camada limite superficial).

Após isso, Yeh & Huang (1975) apresentaram uma solução bidimensional para fontes elevadas com u e k_z , seguindo perfis de potência. Demuth (1978) avançou na solução com as mesmas condições, mas para uma camada verticalmente limitada. Isto é:

$$k_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = z_i \quad (2.6)$$

Adaptando a teoria de similaridade de Monin-Obukhov, a difusão Van Ulden (1978) obteve a solução para a difusão vertical de fontes contínuas próximas ao solo, somente com a hipótese de que u e k_z seguem os perfis de potência.

Nieuwstadt (1980) apresentou uma solução dependente do tempo, utilizando os polinômios de Legendre e coeficiente de difusão dado por:

$$k_z = Gu^*z \left(1 - \frac{z}{z_1}\right) \quad (2.7)$$

G é um valor constante e u^* é a velocidade de fricção.

Nieuwstadt e Haan (1981) estenderam essa solução para o caso de crescimento da altura da camada limite.

Ao final da década de oitenta, Kock (1989) desenvolveu uma solução analítica bidimensional para o nível do solo com perfis de potência da velocidade do vento e coeficiente de difusão incluindo os efeitos de absorção ao nível do solo.

Chrysikopoulos *et al.* (1992) apresentaram uma solução tridimensional para o transporte de emissões, sem empuxo de uma fonte área contínua ao nível do solo para os mesmos perfis de u e k_z dados pelas equações (2.1), mas incluindo deposição como um mecanismo de remoção.

Ainda nesse mesmo ano, Van Ulden (1992) apresentou uma solução aproximada que descreve o campo de concentração como a soma de “puffs” (emissão instantânea).

Moura *et al.* (1995) propuseram uma solução analítica da equação de difusão-advecção unidimensional dependente do tempo, para uma camada limite estável. Na solução foi aplicado o método ADMM e foi utilizado um coeficiente de difusão para cada subcamada dada por Degrazia e Moraes (1992) e, Moreira (1996) propôs uma solução para o caso bidimensional estacionário usando ADMM para a CLC.

Nos experimentos de Pires (1996) e Moura (1995) foi obtida a solução analítica da equação de difusão unidimensional dependente do tempo, sem vento, utilizando o coeficiente de difusão k_z de Degrazia *et al.* (1997) para o caso estável e convectivo, respectivamente.

Vilhena *et al.* (1998) e Moreira (1998) resolveram, analiticamente, a equação difusão-advecção estacionária, considerando a turbulência não homogênea e utilizando o sistema de

multicamadas. Esse modelo, diferentemente dos modelos Gaussianos, não considera o coeficiente de difusão constante em toda a CLP.

Stevens (2000) apresentou uma solução analítica com coeficiente de difusão (perfil k) e fluxos não-locais para um regime semi-estacionário. Os resultados mostraram como diferentes processos contribuem para o perfil quase uniforme de calor e/ou outros escalares em uma camada limite convectiva.

Utilizando a técnica ADMM (Advection Diffusion Multilayer Model) - para estimar o campo de concentração de poluentes na CLC - Ferreira Neto (2003) resolveu a equação de difusão-advecção bidimensional não estacionária. A ideia básica da técnica consiste na discretização da CLP em N subcamadas, em cada subcamada a equação de difusão-advecção é resolvida pela técnica transformada de Laplace, considerando valores médios para os coeficientes de difusão e perfil do vento.

Costa (2003) resolveu a equação, com termo contragradiente, no fechamento da turbulência não-local, fazendo surgir um termo adicional na equação de difusão advecção. Os parâmetros que envolvem a turbulência assumem um valor médio constante em cada subcamada, aplicado ao experimento de Copenhagen.

Testando diversas parametrizações, Costa (2005) aplicou o método ADMM em uma camada limite estável e Moreira (2005), usando essa mesma técnica, modelou para condições de vento fraco. A mesma solução foi aplicada para simular a dispersão de tritium do experimento de Angra dos Reis (Moreira *et al.*, 2005a). No ano de 2006, foi apresentada uma revisão completa sobre a técnica ADMM por Moreira *et al.* (2006).

Exibindo todos os problemas de dispersão de poluentes na atmosfera, até então resolvidos pela técnica ADMM, Moreira *et al.* (2006) apresentaram as aplicações desse método. Após isso, Buligon *et al.* (2006) apresentaram uma solução semi-analítica com equação do telégrafo e fluxo contragradiente, assim, a equação estimava - de um modo mais completo - a estrutura complexa da dispersão turbulenta.

Diante das limitações para representar as condições convectivas em uma camada limite planetária, Pleim (2007) apresentou um modelo combinando ao fechamento local e não-local.

O modelo simulou bons resultados para os parâmetros meteorológicos e para concentrações químicas.

Já Buske *et al.* (2007) estendeu a solução analítica apresentada por Moreira *et al.* (2005c) para condições de vento fraco, aplicando a técnica de transformação de Laplace e considerando o coeficiente de difusão, em função da distância da fonte. O desempenho do modelo, para o caso instável, foi avaliado com a concentração ao nível do solo do experimento de campo, a partir de condições de vento fraco e realizadas pelo Instituto Indiano de Tecnologia. Uma das limitações apresentadas é: o modelo não considera a variável direção do vento típica de ventos fracos.

Recentemente, Moreira (2010) apresentou o desempenho da solução utilizando uma parametrização dos perfis verticais de vento e coeficiente de difusão, sob a técnica de multicamadas para dispersão de poluentes para deposição seca ao nível do solo. As avaliações foram feitas pela relação aos dados experimentais de difusão de Hanford. E os resultados mostraram que o modelo de dispersão, com a parametrização incluída, produz um bom ajuste dos dados de concentração ao nível do solo - medidos - e não há grandes diferenças entre as parametrizações retirados da literatura (no total foram utilizadas 5 parametrizações diferentes).

Guerrero *et al.* (2013) apresentaram um solução analítica unidimensional transiente de forma fechada, para equação de difusão-advecção, através da Técnica de Transformada Integral Clássica considerando o sistema de multicamadas na CLA.

Recentemente, Moreira (2014) apresentou a contribuição da solução da equação de difusão atmosférica, considerando a velocidade do vento como uma função da altura vertical e o coeficiente de difusão como uma função da distância a favor do vento - partindo da fonte e da altura vertical. Os resultados sugerem melhoras na descrição do processo de transporte turbulento de efluente atmosférico que é liberado pela fonte baixa contínua, em condições convectivas, considerando a inclusão do efeito de memória como modelado pela teoria de Taylor.

Apesar de ser utilizada apenas na resolução de problemas bidimensionais, a técnica vem sendo utilizada e apresenta resultados satisfatórios. Uma das principais direções da pesquisa,

nessa área, é buscar soluções analíticas e semi-analíticas para os problemas de dispersão, pois nesse tipo de solução, todos os parâmetros aparecem de forma explícita e facilitam a verificação sobre os parâmetros do modelo.

3 OBJETIVOS

3.1 Objetivo Geral

► Obter a solução bidimensional da equação difusão-advecção com fechamento não-local, para diferentes coeficientes de difusão e confronto dessa solução, com experimento de tanque em uma camada limite convectiva.

3.2 Objetivos Específicos

► Descrever a influência do termo contragradiente (termo adicional) na equação de difusão-advecção na dispersão de poluentes;

► Identificar se o termo adicional da equação efetivamente melhora os resultados, em uma camada limite convectiva;

► Avaliar as expressões para diferentes coeficientes de difusão.

4 CAMADA LIMITE PLANETÁRIA

O conhecimento detalhado da evolução espacial e temporal da atmosfera, em particular da Camada Limite Planetária (CLP) ou Camada Limite Atmosférica (CLA) que se estende de 100 a 3000 m, é um importante fator para o gerenciamento ambiental e para o melhor entendimento da dispersão de poluentes na atmosfera.

A grande maioria das atividades humanas ocorre e gera consequências nessa camada, portanto é preciso considerar que tais atividades representam um alto caráter de importância devido as interferências e modificações que podem provocar à CLP.

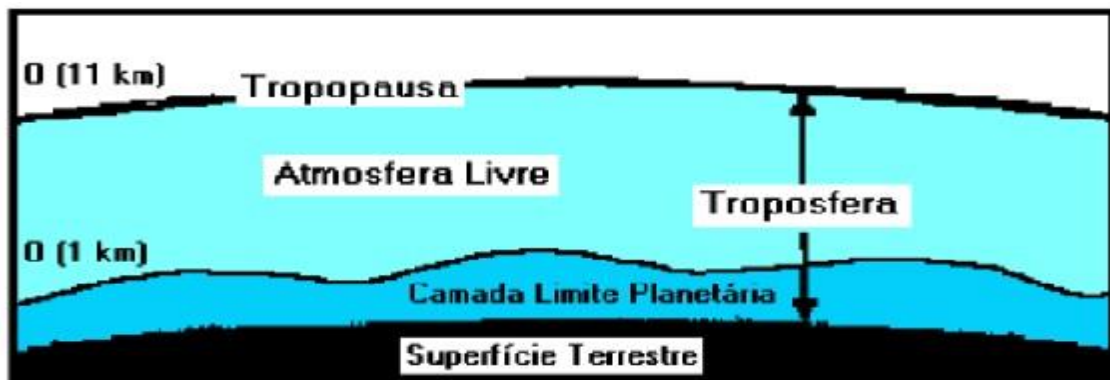


Figura 01: Divisão da troposfera. Stull 1988.

Segundo Stull (1988), a “camada limite planetária é a parte da troposfera que é diretamente influenciada pela presença da superfície da Terra e responde as forçantes superficiais com uma escala de tempo de uma hora ou menos”. Por estar em contato com a superfície, a CLP sofre o ciclo diário de: temperatura, energia, arrasto friccional, transferência de calor, emissão de poluentes, modificações do escoamento induzidas pelo terreno, aceleração de Coriolis, etc.

A fonte primária de energia da atmosfera é a radiação solar, pois grande parte dessa energia é absorvida pela superfície terrestre e o restante é transmitido para atmosfera em processo com a camada limite. Cerca de 90% dessa radiação é absorvida pelos oceanos, causando evaporação e, o calor latente que é liberado na atmosfera é condensado e se transforma em vapor d’água, servindo de combustível para os processos na camada limite.

Todo esse processo ocorre devido à interação da CLA com a superfície, o que deixa a CLA turbulenta e faz com que todas as substâncias emitidas nessa camada (como os poluentes, o vapor d’água, entre outros), sejam dispersas por ação dessa turbulência, conforme as

propriedades físicas e químicas das substâncias que podem ocupar todo o seu volume. Desse modo, estudos e avaliações sobre a estrutura da CLA podem fornecer importantes informações para diversas áreas de atuação, incluindo: a poluição atmosférica, a meteorologia agrícola, hidrologia, meteorologia aeronáutica, meteorologia de mesoescala, previsão do tempo e climática (Garra, 1994).

A espessura da CLP sofre mudanças no tempo e no espaço, podendo variar de centenas de metros a poucos quilômetros, apresentando estruturas variadas como:

- Camada Limite Neutra (CLN): Ocorre durante o período de transição do dia para a noite e nessa camada atmosférica não há inibição ou intensificação da turbulência e a variação da temperatura potencial é nula.
- Camada Limite Convectiva (CLC): Provocada pelo aquecimento diurno da superfície, alcança a espessura de 1000 a 2000 m e a temperatura potencial diminui, de acordo com a altura, e a turbulência é intensificada.
- Camada Limite Estável (CLE): Ocorre durante o resfriamento noturno da superfície da terra e alcança uma altura de 100 a 300 m. O comportamento da temperatura potencial é positivo, ou seja, aumenta de acordo com o aumento da altura. Em uma atmosfera estável, a turbulência é reduzida.
- Turbulência: Constituída por turbilhões que se sobrepõem variando de 1mm a 300 m. Gerada pelas forças térmicas (aquecimento solar) e mecânica (cisalhamento próximo a superfície).
- Vento médio: É responsável pelo transporte horizontal (transporte advectivo), apresenta menores valores próximos à superfície devido à rugosidade da mesma (mecanismo de fricção). Quando comparados com os ventos na horizontal, os ventos médios na vertical são menos intensos.
- Ondas: São mais frequentes na CLP noturna, transportam pouco calor, umidade e outros escalares como os poluentes, por exemplo, mas são efetivas para transporte de momentum e energia. Podem ser geradas, localmente, pelo cisalhamento do vento médio e pelo escoamento

médio sobre obstáculos. Podem ser classificadas, de acordo com a estabilidade, em três categorias: neutra, instável e estável. Isso porque a estabilidade das ondas pode ter interferência direta da variação da temperatura potencial associada à altura.

Diante dessas características, é relevante considerar que, em áreas urbanas e industriais, o conhecimento da altura da CLA determina o volume disponível para o transporte e dispersão dos poluentes e contaminantes atmosféricos. Além de influenciar no modo como essa dispersão ocorre, como por exemplo, nos coeficientes de difusão e estabilidade atmosférica que dependem das condições meteorológicas e da turbulência na camada. No caso da modelagem da dispersão atmosférica, a altura da CLA é um dado essencial para alimentação do modelo, influenciando fortemente na avaliação da qualidade do ar em uma determinada região.

Considerando, também, que a CLA sofre a variação dos forçantes superficiais, a sua dinâmica e sua estrutura são afetadas em uma curta escala de tempo, pois as características dessa camada variam de acordo com a hora do dia, principalmente, devido à radiação solar, por isso, usualmente a análise da camada limite é separada em camadas diurna e noturna. Durante o dia, nota-se a camada diurna, nesta os fluxos superficiais de energia são mais expressivos e, portanto, o desenvolvimento da CLA é mais pronunciado. Durante a noite, nota-se a camada noturna, nessa os fluxos são reduzidos e a estrutura da CLA é bastante diferente. A variação temporal e a subdivisão da CLA podem ser visualizadas na figura 2 (Stull, 1988).

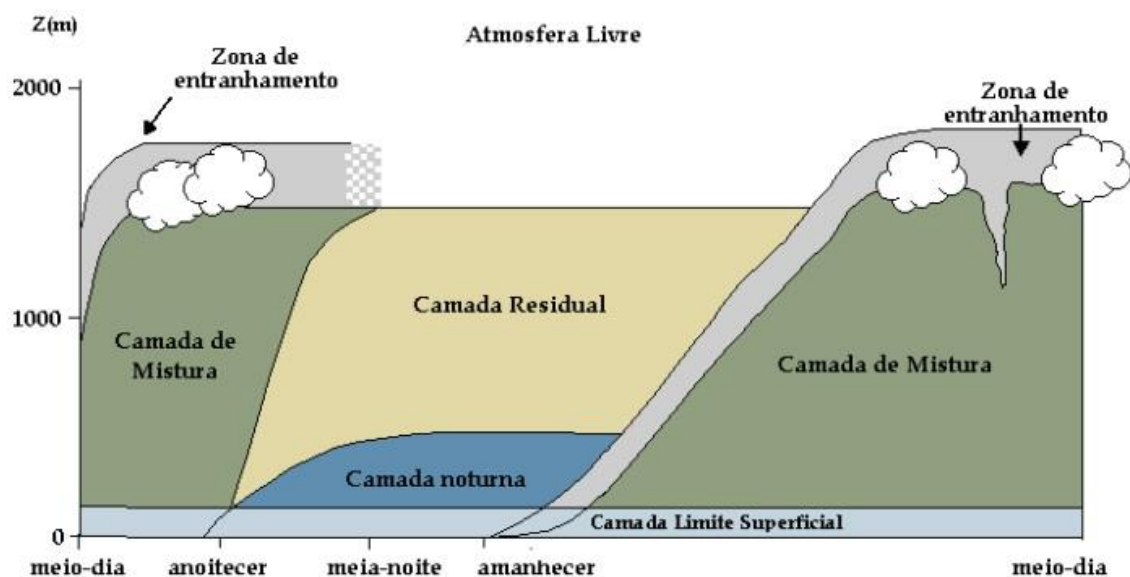


Figura 02: Evolução diária Camada Limite Planetária. Adaptada de Stull (1988).

Portanto, em um dia ensolarado e com ventos fracos a turbulência é produzida predominantemente por convecção térmica, por isso a CLA é denominada de camada convectiva. Desse modo, observa-se que o crescimento diurno da CLA se associa às propriedades da superfície e do topo das camadas, pois as fontes de convecção - que incluem o fluxo de calor sensível da superfície, quando a superfície está aquecida devido à radiação solar - promovem o resfriamento radiativo no topo da CLA, o que pode gerar um fluxo de calor para o interior da camada (fluxo de calor negativo).

Embora exista predominância de turbulência térmica na camada diurna, o vento também pode gerar turbulência mecânica na camada, especialmente quando há proximidade com a superfície, isso porque ocorre atrito com a superfície e gera um cisalhamento do vento. Já a zona de entranhamento é a nomeação para a camada onde ocorre a inversão térmica, que funciona como uma barreira para o transporte de poluentes.

Considerando o período noturno e com pouca cobertura de nuvens, nota-se que a superfície perde calor por causa da radiação de ondas longas que vai para o espaço e se resfria rapidamente, fazendo com que o fluxo de calor sensível inverta seu sinal no momento em que o solo atinge a temperatura menor do que da atmosfera. Resultando na formação de uma região de estabilidade atmosférica na superfície, conhecida como camada estável.

Na camada estável existe uma inversão térmica a partir da superfície, onde as forças de empuxo atuam suprimindo a turbulência, tornando-a fraca ou inexistente, tendo como consequência a redução da mistura vertical de poluentes. Neste caso, com ausência de radiação solar, a turbulência na CLA é produzida por ação mecânica, devido ao atrito do vento com a superfície. Acima da camada estável, encontra-se a camada residual que pode conservar substâncias anteriormente emitidas na camada convectiva diurna.

Durante o dia, a camada convectiva é determinada pelos dados de radiossondagem (da manhã) e com valores referentes aos horários e à temperatura superficial que podem ser medidos em uma estação meteorológica. Durante o período noturno, a porção turbulenta da camada estável é determinada por uma simples equação empírica, relacionada com a velocidade do vento, que é responsável pela produção mecânica de turbulência.

No presente trabalho foi realizada a análise da CLC e das concentrações superficiais obtidas, comparando o modelo com as concentrações observadas no experimento de tanque, que se realizou sob fortes condições convectivas.

4.1 Características da Camada Limite Convectiva (CLC)

A Camada Limite Convectiva é a camada formada após o nascer do sol, ou seja, quando o solo começa a ser aquecido e aquece também a camada de ar adjacente (fluxo de calor positivo) iniciando, assim, a convecção térmica. Entretanto, ao cessar o pôr do sol o fluxo de calor se torna negativo. Essa camada é caracterizada por forte mistura vertical, produzida pela convecção, que é definida como região que se estende do solo ($z = 0$) até a base da inversão ($z = z_i$).

A CLC geralmente atinge uma altura típica de 1000 a 2000m no meio da tarde, quando há maior disponibilidade de energia. O que caracteriza a CLC pela forte mistura vertical que ocorre devido à distribuição do vento e da temperatura potencial - quase constantes nessa camada - e que fazem com que apenas 10% apresente gradientes relacionados à direção do vento, à velocidade do vento médio e à temperatura.

Diante desses pressupostos, a evolução da CLC depende, diretamente, do fluxo de calor gerado após o nascer do sol, da presença de nebulosidade e da insolação incidente na superfície terrestre que ao cair reduza intensidade das termas, formadas devido ao fluxo de calor da superfície. A figura 3 apresenta uma divisão da CLC em três camadas, apontando também como se apresenta a variação da temperatura potencial e da velocidade média do vento com a altura.

Nota-se que a camada superficial, predominante da turbulência mecânica, deve-se à fricção da velocidade do vento com a superfície terrestre, pois uma característica dessa camada é apresentar gradientes de temperatura potencial e velocidade do vento com a altura e o fluxo de calor turbulento, que é aproximadamente constante.

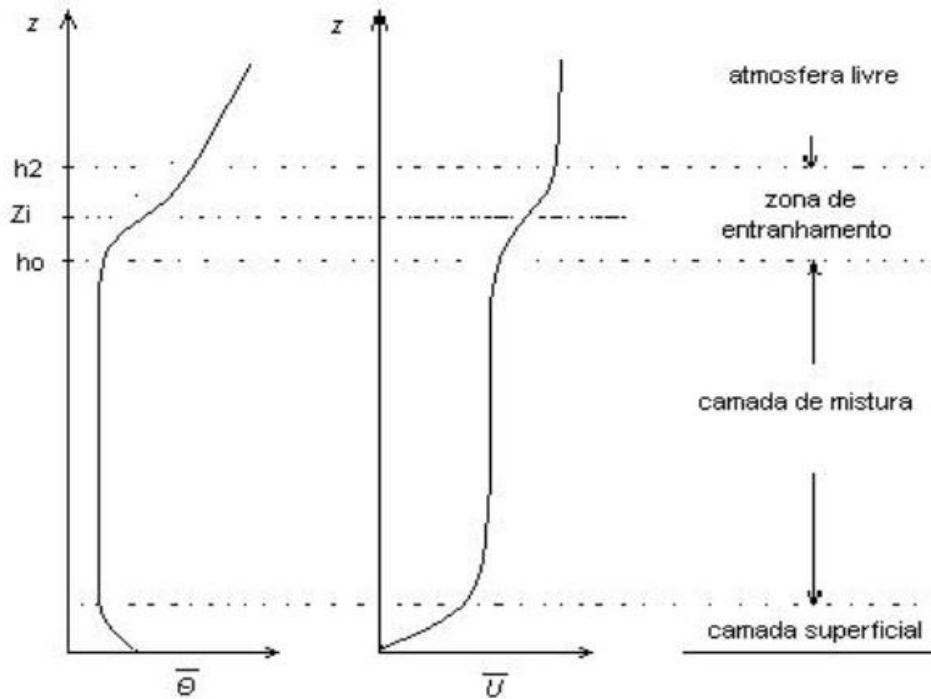


Figura 03: Variação da temperatura potencial e da velocidade média do vento com a altura na CLC.

Essa camada está restrita às alturas menores do que $z = |L|$, e L é o comprimento de Monin-Obukhov, definido por:

$$L = -\frac{u_*^3}{k_g \overline{(w\theta)}} \quad (4.1)$$

Onde ϑ é a temperatura potencial média, $\overline{(w\theta)}$ é o fluxo de calor turbulento na superfície, u_* é a velocidade de fricção na superfície, k é a constante de Von Kármán e g é a aceleração da gravidade.

Considerando a definição descrita acima, para uma CLC bem desenvolvida, $|L|$ deve apresentar valores típicos entre 10 e 100m, de modo que $z_i/|L| \geq 10$ (Panofsky e Dutton, 1984). A razão $z_i/|L|$ pode ser considerada como parâmetro de estabilidade atmosférica, uma vez que expressa a importância da turbulência convectiva (fluxo de calor) em relação à turbulência mecânica (cisalhamento do vento). Na CLS, são observados grandes gradientes de temperatura e velocidade do vento e o fluxo de calor turbulento, o que é praticamente constante.

A segunda camada, denominada de camada de mistura, devido à intensa mistura vertical que tende a conservar as variáveis praticamente constantes com a altura, os parâmetros mais importantes na descrição são o z_i e w_* . Segundo modelos numéricos (Deardorff, 1972) e experimentos de laboratório (Willis e Deardorff, 1974), a escala de velocidade convectiva é expressa por:

$$w_* = \left[\frac{g}{\theta} (\overline{w\theta})_0 z_i \right]^{1/3} \quad (4.2)$$

Os grandes turbilhões convectivos são expressos em função de z_i e as velocidades turbulentas relacionadas com w_* .

Próximo ao topo se localiza a terceira camada, que é a zona de entranhamento caracterizada pelo fluxo de calor negativo. Nessa camada a região de ar é estaticamente estável, no topo da camada de mistura que é onde ocorre o entranhamento de ar da atmosfera livre para baixo e penetração convectiva das plumas térmicas para cima.

As substâncias emitidas na atmosfera se dispersam através da difusão turbulenta, causada pela variação de temperatura na camada limite e, tal variação provoca o aquecimento e resfriamento da superfície da terra, fazendo com que o transporte das partículas seja dominado na horizontal - pelo vento médio (advecção) - e na vertical - pela turbulência. Consequentemente, o transporte e a dispersão de poluentes na atmosfera é, geralmente, descrito pela equação de difusão-advecção.

4.2 Fechamento local e não-local

O fechamento local e não-local pode ser compreendido pela aproximação Euleriana que é utilizada para modelagem das propriedades estatísticas, da concentração de poluentes em um escoamento turbulento (como o que ocorre na CLC), que é muito utilizada no campo de estudos da poluição atmosférica. Nesse contexto, a equação de difusão-advecção que, descreve concentrações integradas lateralmente a partir de uma fonte contínua, pode ser escrita como:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = - \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} \quad (4.3)$$

Onde \bar{c} é a concentração integrada lateralmente, ué a velocidade média do vento na direção horizontal e $\overline{w'c'}$ é o fluxo turbulento de poluentes na vertical.

O modelo matemático mais utilizado se preocupa em solucionar o problema de fechamento da equação (4.1), baseando-se na hipótese de transporte por gradiente que, em analogia com a difusão molecular, assume a turbulência como proporcional à magnitude do gradiente de concentração média:

$$\overline{w'c'} = -k_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (4.4)$$

Onde k_z é o coeficiente de difusão vertical e, dessa forma, ao introduzindo a equação (4.2) na equação (4.1), obtém-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (4.3)$$

Esta equação é a mais utilizada na obtenção de um modelo de dispersão de poluentes atmosféricos.

As observações na atmosfera indicam que a dispersão de poluentes na CLC ocorre de forma assimétrica, pois essa camada é 40% ocupada por plumas térmicas (updrafts), enquanto nos demais 60% é ocupada pelo ar que desce mais frio (downdrafts).

Desse modo, caso a área de correntes descendentes for maior que a de correntes ascendentes há assimetria positiva ($s_k > 0$), caso contrário, assimetria negativa ($s_k < 0$). Sendo assim, é importante levar em conta a assimetria no processo de dispersão de poluentes atmosféricos e verificar a sua influência.

A assimetria s_k é o grau de desvio, ou afastamento da simetria, caso a curva de frequência de uma distribuição tenha uma “cauda” maior à direita da ordenada máxima do que à esquerda, diz-se que a distribuição é desviada para a direita, ou que ela tem assimetria positiva. Ocorrendo o inverso, diz-se que ela é desviada para a esquerda, ou que tem assimetria negativa. Como mostrado nas figuras 04, 05, 06.

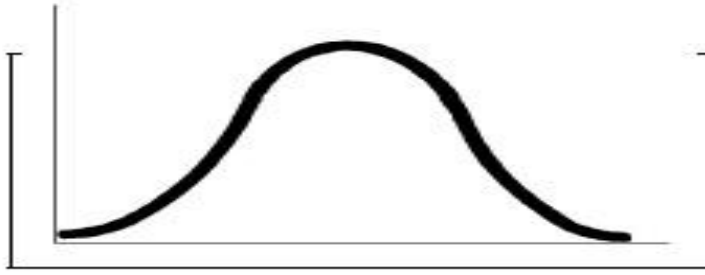


Figura 04: Curva Simétrica

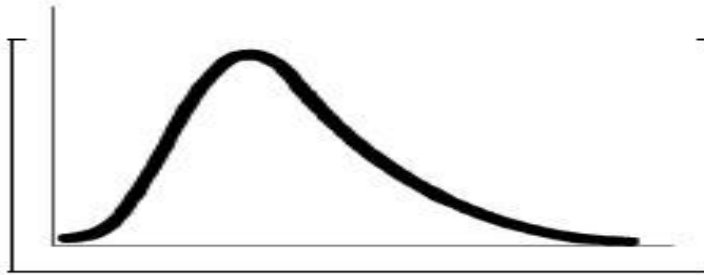


Figura 05: Assimetria Positiva

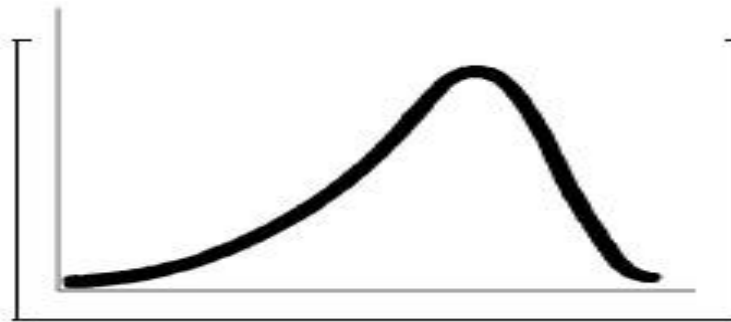


Figura 06: Assimetria negativa

Quando a área de correntes descendentes é maior que a de correntes ascendentes, tem-se a assimetria positiva, caso contrário, a assimetria é negativa.

Escalas de Assimetria:

$ S_k < 0.15$	→	Assimetria pequena
$0.15 < S_k < 1$	→	Assimetria moderada
$ S_k > 1$	→	Assimetria elevada

Tabela 01: Escala de Assimetria.

Se $S_k = -0,5 \rightarrow$ Logo a assimetria é considerada moderada e negativa.

Se $S_k = 1,5 \rightarrow$ Logo, a assimetria é considerada elevada e positiva.

Os modelos numéricos mostram que essa estrutura assimétrica da CLC é responsável por padrões de dispersão vertical, que são distintos dos tradicionais padrões Gaussianos (Lamb, 1982).

E tal assimetria, em função da densidade de probabilidade e da velocidade vertical, é apontada como o mecanismo responsável pelo rápido afundamento de contaminantes que são abandonados por altas chaminés na CLC.

Partindo desses pressupostos, diferentemente da hipótese representada pela equação (4.2), considera-se uma equação genérica para a difusão turbulenta dada pela expressão (Van Dop, 2001):

$$\left(1 + \frac{uS_k\sigma_w T_{lw}}{2} \frac{\partial}{\partial z}\right) \overline{w'c'} = -K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \quad (4.4)$$

Onde s_k é a assimetria (skewness), T_{lw} é a escala de tempo Lagrangeana vertical e σ_w é a velocidade turbulenta vertical. Nota-se, a partir da equação (4.4), que o fluxo acrescido à sua derivada é proporcional ao gradiente médio. Portanto, introduzindo-se a equação (4.4) na equação (4.1), obtém-se:

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{uS_k\sigma_w T_{lw}}{2} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (4.5)$$

ou

$$u \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) \quad (4.6)$$

Onde β é dado por:

$$\beta = \frac{uS_k\sigma_w T_{lw}}{2} \quad (4.7)$$

Observa-se que surge um termo adicional na equação de difusão-advecção e, esse termo adicional - que aparece na equação (4.6) - considera o caráter não-local na dispersão. Assim, o caráter local indica que há interrelação apenas entre regiões vizinhas, ao passo que, o caráter não-local indica que quaisquer regiões se interrelacionam entre si. A figura 07, abaixo, mostra um esquema desses processos.

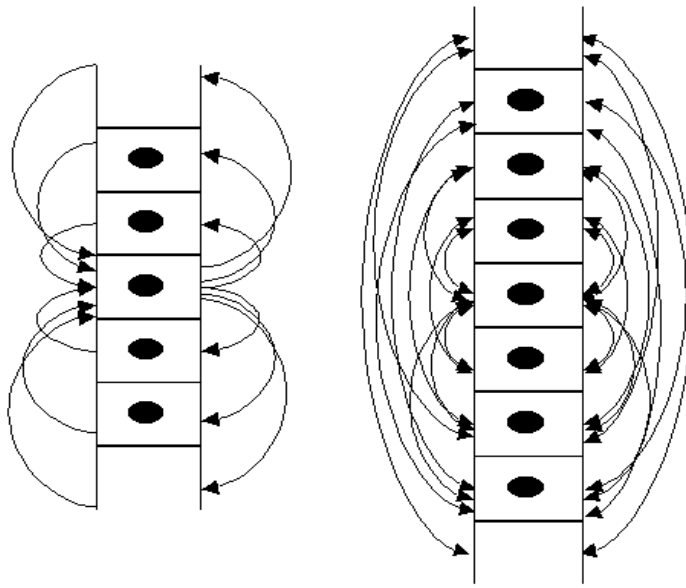


Figura 07: Efeito local e não-local na dispersão.

Analisando a equação (4.6), observa-se que quando $s_k \rightarrow 0$, tem-se $\beta \rightarrow 0$, recaindo na equação original (4.3) que não considera o caráter não-local, na dispersão de poluentes. Desse modo, a nova equação (4.6) gerada pela introdução de um termo que considera o caráter não-local, na equação de difusão-advecção, estima de modo mais completo a estrutura complexa da dispersão turbulenta.

5 METODOLOGIA

Há, na literatura, várias soluções analíticas para a equação de difusão-advecção, porém, a maioria pode somente ser usada para turbulência homogênea. Isso se deve pelo fato da maioria considerar os coeficientes de difusão constantes, utilizando o método de discretização da CLP em um sistema de multicamadas. O que permite a utilização desse modelo para turbulência não-homogênea, representando assim um melhor entendimento acerca da estrutura da CLP.

Uma forma de obter a solução da equação (4.6) é discretizando a CLC em N subcamadas, ou seja, considerando a CLC sendo um sistema de multicamadas (Vilhena *et al.* 1998). Como é possível visualizar o sistema na figura 08, sendo que n^* é a camada onde ocorre a emissão do poluente:

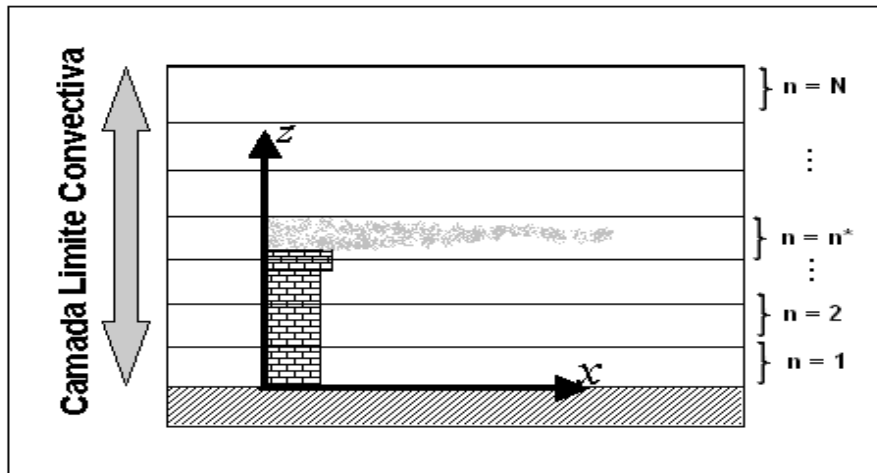


Figura 08: Desenho esquemático do modelo.

Para a obtenção da solução analítica da equação (4.6) é preciso considerar a dependência do coeficiente de difusão vertical k_z , do perfil da velocidade do vento u e β em relação à variável z . Dessa forma, a altura z_i da CLC é discretizada em N subintervalos, obtendo-se valores médios para k_z , u e para β dentro de cada intervalo:

$$k_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} k_z(z) dz$$

$$u_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} u(z) dz \quad (5.1)$$

$$\beta_n = \frac{1}{z_{n+1} - z_n} \int_{z_n}^{z_{n+1}} \beta(z) dz$$

Desse modo a equação (4.6) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$u_n = \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} = k_{z_n} \frac{\partial^2 c_n}{\partial z^2} - \frac{\beta_n}{2} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \right) \quad (5.2)$$

Com $z_n \leq z \leq z_{n+1}$, $x > 0$ e $n = 1, 2, \dots, N$. Esta equação deve ser resolvida para cada uma das subcamadas.

Para solucionar a equação (5.2) é preciso adotar como fronteiras a superfície terrestre e a altura da CLC, supondo que não há passagem de qualquer poluente, ou seja, o fluxo é zero no solo e no topo da CLC. Portanto, a equação (5.2) está sujeita às seguintes condições de contorno:

$$k_{z_n} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad \text{em} \quad z = 0, z_i \quad (5.3)$$

E, supondo que é uma fonte contínua com taxa de emissão contínua Q na altura H_s tem-se a seguinte condição:

$$\bar{c}_n(0, z) = \frac{Q}{u_n} \delta(z - H_s) \quad (5.4)$$

Onde δ é a função generalizada Delta de Dirac.

Além disso, pressupõe-se que o contato perfeito entre as subcamadas, nas quais a CLC foi dividida, deve considerar as condições de continuidade para a concentração e fluxo na interface, respectivamente:

$$\begin{aligned} \bar{c}_n &= \bar{c}_{n+1} & z &= z_n \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \dots, (N - 1) \\ k_{z_n} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} & & z &= z_n \quad \text{e} \quad n = 1, 2, \dots, (N - 1) \end{aligned} \quad (5.5)$$

Portanto, a solução da equação, juntamente com a condição de contorno e a condição inicial, é obtida resolvendo N problemas do tipo:

$$\left\{ \begin{array}{l} u_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(k_{zn} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} - \beta_n \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial x} \right) \\ u_n \bar{c}_n(0, z) = Q\delta(z - H_s) \text{ em } x = 0 \\ k_{zn} \frac{\partial \bar{c}_n}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0, z_i \end{array} \right\} \quad (5.6)$$

Para determinar as $2N$ constantes de integração, deve-se considerar $(2N - 2)$ e as condições de continuidade para a concentração e fluxo de concentração na interface (5.5).

Ainda é possível aplicar a Transformada de Laplace na variável x na equação (5.2), e resolver a equação diferencial resultante, o que permite obter:

$$L \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left[k_{zn} \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial z} - \beta \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right] \right\} \quad (5.7)$$

Considerando u e β dependentes de K_{zn} :

$$L \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) = k_{zn} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} \quad (5.8)$$

$$L \left\{ u_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} + L \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left(\beta_n \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \right\} = L \left\{ k_{zn} \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} \quad (5.9)$$

$$u_n L \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} + \beta_n L \left\{ \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right) \right\} = K_{zn} L \left\{ \frac{\partial^2 \bar{c}_n(x, z)}{\partial z^2} \right\} \quad (5.10)$$

$$u_n L \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} + \beta_n \frac{d}{dz} L \left\{ \frac{\partial \bar{c}_n(x, z)}{\partial x} \right\} = K_{zn} \frac{d^2}{dz^2} (L \{ \bar{c}_n(x, z) \}) \quad (5.11)$$

$$u_n [s \bar{C}_n(s, z) - \bar{c}_n(0, z)] + \beta_n \frac{d}{dz} [s \bar{C}_n(s, z) - \bar{c}_n(0, z)] = k_{zn} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) \quad (5.12)$$

$$u_n s \bar{C}_n(s, z) - u_n \bar{c}_n(0, z) + \beta_n s \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) - \beta_n \frac{d}{dz} \bar{c}_n(0, z) = k_{zn} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) \quad (5.13)$$

$$-k_{zn} \frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) + \beta_n s \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) + u_n s \bar{C}_n(s, z) - u_n \bar{c}_n(0, z) - \beta_n \frac{d}{dz} \bar{c}_n(0, z) = 0 \quad (5.14)$$

Dividindo ambos os lados da igualdade da equação (5.14) por $(-k_{zn})$:

$$\frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{zn}} \bar{C}_n(s, z) + \frac{u_n}{k_{zn}} \bar{C}_n(0, z) + \frac{\beta_n}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \bar{c}_n(0, z) = 0 \quad (5.15)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{zn}} \bar{C}_n(s, z) = -\frac{u_n}{k_{zn}} \bar{C}_n(0, z) - \frac{\beta_n}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \bar{c}_n(0, z) \quad (5.16)$$

Aplicando a condição inicial (5.6): $\bar{C}_n(0, z) = \frac{Q\delta(z-H_s)}{u_n}$, tem-se que:

$$\frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{zn}} \bar{C}_n(s, z) = -\frac{Q}{k_{zn}} \delta(z - H_s) - \frac{\beta_n}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \left(\frac{Q\delta(z-H_s)}{u_n} \right) \quad (5.17)$$

Observando que $\frac{d}{dz} \left(\frac{Q\delta(z-H_s)}{u_n} \right) = 0$

Portanto, considerando k, u e β constantes em cada subcamada, chega-se a equação:

$$\frac{d^2}{dz^2} \bar{C}_n(s, z) - \frac{\beta_n s}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \bar{C}_n(s, z) - \frac{u_n s}{k_{zn}} \bar{C}_n(s, z) = -\frac{Q}{k_{zn}} \delta(z - H_s) \quad (5.18)$$

A equação (5.18) é diferencial linear não-homogênea. Para facilitar a notação é preciso reescrevê-la da seguinte forma:

$$\bar{C}_n'' - \frac{\beta_n s}{k_{zn}} \frac{d}{dz} \bar{C}_n' - \frac{u_n s}{k_{zn}} \bar{C}_n = -\frac{Q}{k_{zn}} \delta(z - H_s) \quad (5.19)$$

A solução geral da equação (5.19) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\bar{C}_n = \bar{C}_{np} + \bar{C}_{nh} \quad (5.20)$$

Onde \bar{C}_{np} é a solução particular e \bar{C}_{nh} é a solução homogênea da equação homogênea associada.

5.1 Solução homogênea

Para uma solução homogênea, aplica-se a equação homogênea associada à equação (5.20):

$$\overline{C_n}'' - \frac{\beta_n s}{k_{zn}} \overline{C_n}'(s, z) - \frac{u_n s}{k_{zn}} \overline{C_n}(s, z) = 0 \quad (5.21)$$

Resolvendo-se (5.21):

$$\lambda^2 - \frac{\beta_n s}{k_{zn}} \lambda - \frac{u_n s}{k_{zn}} = 0 \quad (5.22)$$

$$\lambda = \frac{\frac{\beta_n s}{k_{zn}} \mp \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{k_{zn}}\right)^2 - 4 \cdot 1 \cdot \left(-\frac{u_n s}{k_{zn}}\right)}}{2} \quad (5.23)$$

$$\lambda = \frac{\beta_n s}{2k_{zn}} \mp \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{k_{zn}}\right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{zn}}} \quad (5.24)$$

Logo para λ_1 e λ_2 reais e distintos:

$$\overline{C_{n_h}} = A_n e^{\left[\frac{\beta_n s}{2k_{zn}} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{k_{zn}}\right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{zn}}}\right] z} + \beta_n e^{\left[\frac{\beta_n s}{2k_{zn}} - \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{k_{zn}}\right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{zn}}}\right] z} \quad (5.25)$$

5.2 Solução particular

Relacionando a expressão de $\overline{C_{n_h}}$, pode-se chegar a solução particular de $\overline{C_{n_p}}$. Onde $\overline{C_{n_p}}$ pode ser escrito sob forma integral, como segue:

$$\overline{C_{n_p}} = \int_0^{z_i} G(z, t) h(t) dt \quad (5.26)$$

Onde $h(t)$ é uma função impulso, nesse caso, $h(t) = -\frac{Q}{k_{zn}} \delta(t - H_s)$, e $G(z, t)$ é a função de Green definida por:

$$G(z, t) = \frac{y_2(z)y_1(t) - y_1(z)y_2(t)}{W[y_1(t), y_2(t)]} \quad (5.27)$$

Onde $y_1(z)$ e $y_2(z)$ são as duas soluções, linearmente independentes, da equação homogênea associada, e $W[y_1(t), y_2(t)]$ é o Wronskiano das duas soluções, dado por:

$$W[y_1(t), y_2(t)] = \begin{vmatrix} y_1(t) & y_2(t) \\ y_1'(t) & y_2'(t) \end{vmatrix} \quad (5.28)$$

Como:

$$y_1(z) = e^{\left[\frac{\beta_n s}{2k_{zn}} + \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{k_{zn}} \right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{zn}}} \right] z}$$

$$y_2(z) = e^{\left[\frac{\beta_n s}{2k_{zn}} - \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{k_{zn}} \right)^2 + \frac{4u_n s}{k_{zn}}} \right] z}$$

Denotando que:

$$F_n = \frac{\beta_n s}{2K_{zn}} \quad \text{e} \quad R_n = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n s}{2K_{zn}} \right)^2 + \frac{4u_n s}{K_{zn}}}$$

Assim, encontra-se: $W[y_1(t), y_2(t)]$:

$$W[y_1(t), y_2(t)] = \begin{vmatrix} e^{[F_n + R_n]t} & e^{[R_n - F_n]t} \\ [F_n + R_n]e^{[F_n + R_n]t} & [F_n - R_n]e^{[F_n - R_n]t} \end{vmatrix} \quad (5.29)$$

$$= [F_n - R_n]e^{[F_n + R_n]t}e^{[F_n - R_n]t} - [F_n + R_n]e^{[F_n - R_n]t}e^{[F_n + R_n]t} \quad (5.30)$$

$$= e^{[F_n + R_n]t}e^{[F_n - R_n]t}[(F_n - R_n) - (F_n + R_n)] \quad (5.31)$$

$$= -2R_n e^{[F_n + R_n]t + [F_n - R_n]t} = -2R_n e^{2F_n t} \quad (5.32)$$

Portanto, a função de Green procurada para o presente problema é:

$$G(z, t) = \frac{e^{[F_n - R_n]z}e^{[F_n + R_n]t} - e^{[F_n + R_n]z}e^{[F_n - R_n]t}}{-2R_n e^{2F_n t}} \quad (5.33)$$

Assim, substituindo (5.32) por (5.25), obtém-se:

$$\begin{aligned}
\overline{C_{np}} &= \int_0^{z_i} \frac{e^{[F_n-R_n]z} e^{[F_n+R_n]t} - e^{[F_n+R_n]z} e^{[F_n-R_n]t}}{-2R_n e^{2F_n t}} \left[-\frac{Q}{K_{zn}} \delta(t - H_s) \right] dt \\
&= \frac{Q}{2R_n k_{zn}} \left[e^{F_n - R_n z} \left(\int_0^{z_i} \frac{e^{[F_n+R_n]t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - H_s) dt \right) - \left(e^{[F_n+R_n]z} \int_0^{z_i} \frac{e^{[F_n-R_n]t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - H_s) dt \right) \right] \\
&= \frac{Q}{2R_n k_{zn}} \left[e^{F_n - R_n z} \left(\int_0^{z_i} \frac{e^{F_n t} e^{R_n t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - H_s) dt \right) - \left(e^{[F_n+R_n]z} \int_0^{z_i} \frac{e^{F_n t} e^{-R_n t}}{e^{2F_n t}} \delta(t - H_s) dt \right) \right] \\
&= \frac{Q}{2R_n k_{zn}} \left[e^{F_n - R_n z} \left(\int_0^{z_i} e^{-[F_n-R_n]t} \delta(t - H_s) dt \right) - \left(e^{[F_n+R_n]z} \int_0^{z_i} e^{-[F_n+R_n]t} \delta(t - H_s) dt \right) \right] \\
&= \frac{Q}{2R_n k_{zn}} \left[e^{F_n - R_n z} \left(e^{-[F_n-R_n]H_s} \right) - e^{[F_n+R_n]z} \left(e^{-[F_n+R_n]H_s} \right) \right]
\end{aligned} \tag{5.34}$$

Assim, a solução particular é:

$$\overline{C_{np}} = \frac{Q}{2R_n K_{zn}} \left(e^{[F_n-R_n][z-H_s]} - e^{[F_n+R_n][z+H_s]} \right) \tag{5.35}$$

5.3 Solução geral

Assim, a solução geral da equação (5.19) é dada por:

$$\overline{C_n} = \overline{C_{np}} + \overline{C_{nh}}$$

$$\overline{C_n} = (s, z) = A_n e^{[F_n-R_n]z} + B_n e^{[F_n+R_n]z} + \frac{Q}{2R_n K_{zn}} \left(e^{[F_n-R_n][z-H_s]} - e^{[F_n+R_n][z+H_s]} \right) \tag{5.36}$$

Onde, o último termo do lado direito é válido na subcamada que contém a fonte. Para determinar as constantes A_n e B_n , aplicam-se as $(2N - 2)$ condições de continuidade de interface (5.5):

$$\text{em } z = 0: \quad k_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \overline{C_1}(s, 0) = 0$$

$$\begin{aligned}
\text{em } z = z_1: & \quad \begin{cases} \bar{C}_1(s, z_1) = \bar{C}_2(s, z_1) \\ k_{z_1} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_1(s, z_1) = k_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_2(s, z_1) \end{cases} \\
\text{em } z = z_2: & \quad \begin{cases} \bar{C}_2(s, z_2) = \bar{C}_3(s, z_2) \\ k_{z_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_2(s, z_2) = k_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_3(s, z_2) \end{cases} \\
\text{em } z = z_3: & \quad \begin{cases} \bar{C}_3(s, z_3) = \bar{C}_4(s, z_3) \\ k_{z_3} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_3(s, z_3) = k_{z_4} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_4(s, z_4) \end{cases} \\
& \quad \vdots \quad \quad \quad \vdots \\
\text{em } z = z_{(N-1)}: & \quad \begin{cases} \bar{C}_{n-1}(s, z_{(N-1)}) = \bar{C}_N(s, z_{(N-1)}) \\ k_{z_{(N-1)}} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_{(N-1)}(s, z_{N-1}) = k_{z_n} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_n(s, z_{(N-1)}) \end{cases} \\
\text{em } z = z_i: & \quad k_{z_N} \frac{\partial}{\partial z} \bar{C}_n(s, z_i) = 0
\end{aligned} \tag{5.37}$$

Com as expressões obtidas em (5.37), obtém-se um sistema linear de dimensão ($d = 2N$) dado por $MX=b$.

	M_{11}	M_{12}	0	0	0	0	0	0	...	0
	M_{21}	M_{22}	M_{23}	M_{24}	0	0	0	0	...	0
	M_{31}	M_{32}	M_{33}	M_{34}	0	0	0	0	...	0
	0	0	M_{43}	M_{44}	M_{45}	M_{46}	0	0	...	0
$M =$	0	0	M_{53}	M_{54}	M_{55}	M_{56}	0	0	...	0
	0	0	0	0	M_{65}	M_{66}	M_{67}	M_{68}	...	0
	0	0	0	0	M_{75}	M_{76}	M_{77}	M_{78}	...	0
	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
	0	0	0	0	0	0	$M_{d-1, d-3}$	$M_{d-1, d-2}$	$M_{d-1, d-1}$	$M_{d-1, d}$
	0	0	0	0	0	0	0	0	$M_{d, d-1}$	$M_{d, d}$

(5.38)

$$X = [A_1 \quad B_1 \quad A_2 \quad B_2 \quad A_3 \quad B_3 \dots \dots A_N \quad B_N]^T \quad (5.39)$$

$$b = [0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 \dots -S_{p_{n*}} - S_{p'_{n*}} \quad \dots 0 \quad 0]^T \quad (5.40)$$

Onde $n *$ indica a região de emissão, $S_{p_{n*}}$ é a solução particular e $S_{p'_{n*}}$ é derivada da solução particular, ambas aplicadas na região de emissão, ou seja:

$$S_{p_{n*}} = \frac{Q}{2R_{n*}K_{z_{n*}}} \left(e^{[F_j - R_{n*}][z - H_s]} - e^{[F_j + R_{n*}][z + H_s]} \right) \quad (5.41)$$

$$S_{p'_{n*}} = K_{z_{n*}} R_{n*} \frac{Q}{2R_{n*}K_{z_{n*}}} \left(e^{[F_{n*} - R_{n*}][z - H_s]} - e^{[F_{n*} + R_{n*}][z + H_s]} \right) \quad (5.42)$$

A matriz M , é definida como segue:

$$M_{11} = F_1 - R_1$$

$$M_{12} = F_1 - R_1$$

E para $n = 1, 2, 3, \dots, N$

$$M_{2n, 2n-1} = e^{[F_n + R_n]z_n}$$

$$M_{2n, 2n} = e^{[F_n - R_n]z_n}$$

$$M_{2n, 2n+1} = -e^{[F_{n+1} + R_{n+1}]z_n}$$

$$M_{2n, 2n+2} = -e^{[F_{n+1} - R_{n+1}]z_n}$$

$$M_{2n+1, 2n-1} = K_{z_n} [F_n + R_n] e^{[F_n + R_n]z_n}$$

$$M_{2n+1, 2n} = K_{z_n} [F_n - R_n] e^{[F_n - R_n]z_n}$$

$$M_{2n+1, 2n+1} = K_{z_{(n+1)}} [F_{n+1} + R_{n+1}] e^{[F_{n+1} + R_{n+1}]z_n}$$

$$M_{2n+1, 2n+2} = -K_{z_{(n+1)}} [F_{n+1} - R_{n+1}] e^{[F_{n+1} - R_{n+1}]z_n}$$

E, por fim:

$$M_{d, d-1} = [F_N + R_N] e^{[F_N + R_N]z_N}$$

$$M_{d, d} = [F_N - R_N] e^{[F_N - R_N]z_N}$$

O sistema $MX = b$ será resolvido numericamente utilizando o método de Eliminação de Gauss.

5.4 Inversão da solução

A solução (5.36) foi obtida analiticamente, como pode ser conferido, porém a concentração de poluentes $\bar{c}_n(x, z)$ é determinada ao ocorrer a inversão numericamente $\bar{c}_n(s, z)$.

Para obter a solução da equação, é utilizada a técnica da Transformada de Laplace e do esquema da Quadratura de Gauss para inversão da solução.

A transformada de Laplace de uma função $f(t)$ é $F(s)$, isto é:

$$\mathcal{L}\{f(t)\} = F(s)$$

Então, $f(t)$ é a transformada Inversa de Laplace, simbolicamente:

$$f(t) = \mathcal{L}^{-1}\{F(s)\}$$

A transformada inversa de Laplace também pode ser determinada através do esquema da Quadratura Gaussiana, sendo que:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} p^{-1} e^{pF(p)} dp \approx \sum_{i=1}^N w_i F(p_i) \quad (5.43)$$

Onde w_i e p_i são os pesos e as raízes da Quadratura de Gauss.

Assim, tem-se:

$$\bar{c}_n(x, z) = \mathcal{L}^{-1}\{\bar{c}_n(s, z)\} \quad (5.44)$$

$$\bar{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{sx} \bar{c}_n(s, z) ds \quad (5.45)$$

Fazendo uma mudança de variável:

$$s = \frac{p}{x} \Rightarrow xs = p \quad \text{logo} \quad s \rightarrow \gamma + i\infty \Rightarrow p \rightarrow \gamma^* + i\infty$$

$$s \rightarrow \gamma - i\infty \Rightarrow p \rightarrow \gamma^* - i\infty$$

$$ds = \frac{1}{x} dp \quad e \quad \bar{c}_n(s, z) = F\left(\frac{p}{x}\right), z$$

$$\bar{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L e^{pF\left(\frac{p}{x}, z\right)} \frac{1}{x} dp \quad (5.46)$$

$$x\bar{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L e^{pF\left(\frac{p}{x}, z\right)} dp \quad (5.47)$$

Com continuidade:

$$G(p) = p^\alpha F\left(\frac{p}{x}, z\right) \Rightarrow F\left(\frac{p}{x}, z\right) = G(p)p^{-\alpha}, \quad \text{onde} \quad \alpha = -1$$

Substituindo a igualdade acima (5.45) e usando (5.46), tem-se:

$$x\bar{c}_n(x, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_L e^{pG(p)} p^{-\alpha} dp = \sum_{j=1}^{N_i} w_j G(p_j) \quad (5.48)$$

Implicando em:

$$\bar{c}_n(x, z) = \frac{1}{x} \sum_{j=1}^{N_i} w_j G(p_j) \quad (5.49)$$

Entretanto:

$$G(p) = p^\alpha F\left(\frac{p}{x}, z\right) \quad \text{onde} \quad \alpha = -1$$

Portanto:

$$\bar{c}_n(x, z) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{x} w_j F\left(\frac{p_j}{x}, z\right) \quad (5.50)$$

Ou seja, a solução geral procurada é dada por:

$$\bar{c}_n(x, z) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{x} w_j [A_n e^{[F_{*n} + R_{*n}]z} + B_n e^{[F_{*n} - R_{*n}]z}] \quad (5.51)$$

Para a camada onde há a emissão do poluente é dada por:

$$\bar{c}_n(x, z) = \sum_{j=1}^{N_i} \frac{p_j}{x} w_j [A_n e^{[F_{*n} + R_{*n}]z} + B_n e^{[F_{*n} - R_{*n}]z}] + \frac{Q}{2R_{*n}K_{zn}} (e^{[F_{*n} - R_{*n}][Z - H_s]} - e^{[F_{*n} + R_{*n}][Z - H_s]})(5.52)$$

Sendo que:

$$F_{*n} = \frac{\beta_n}{2K_{zn}} \frac{p_j}{x} \quad \text{e} \quad R_{*n} = \frac{1}{2} \sqrt{\left(\frac{\beta_n}{K_{zn}} \frac{p_j}{x}\right)^2 + \frac{4u_n}{K_{zn}} \frac{p_j}{x}}$$

Onde w_j e p_j são, respectivamente, os pesos e as raízes da Quadratura de Gausse N_i é o número de inversões.

6 DADOS DO EXPERIMENTO

Para avaliar o modelo, realizado em laboratório sob condições de forte convecção, foram utilizados dados do experimento de tanque de Willis e Deardorff (Willis e Deardorff, 1978).

Para determinar se o experimento é fonte alta ou baixa, foi preciso considerar a altura em que ocorrem a emissão do poluente e a altura da CLC (z_i), sendo:

Se $\frac{H_s}{z_i} < 0.1 \rightarrow$ o experimento é considerado de fonte baixa.

Se $\frac{H_s}{z_i} > 0.1 \rightarrow$ o experimento é considerado fonte alta.

Considerando, também, a razão entre a altura da CLC (z_i) e do comprimento de Monin-Obukhov é possível determinar se o experimento é de convecção fraca, moderada ou alta, (Panofsky e Dutton, 1984);

Se $\frac{z_i}{|L|} < 5 \rightarrow$ considera-se convecção fraca.

Se $5 < \frac{z_i}{|L|} < 10 \rightarrow$ considera-se convecção moderada.

Se $\frac{z_i}{|L|} > 10 \rightarrow$ considera-se convecção alta.

Assim, o experimento utilizado para validação do modelo foi realizado em um tanque em camadas de água estratificada, onde a convecção foi inicialmente mantida pela aplicação de uma taxa de aquecimento elevado no inferior do tanque, gerando assim forte convecção. Na intenção de estudar os processos de dispersão turbulenta, no interior do tanque, foram liberadas gotas de óleo sem empuxo de uma determinada altura, ao longo do comprimento do tanque.

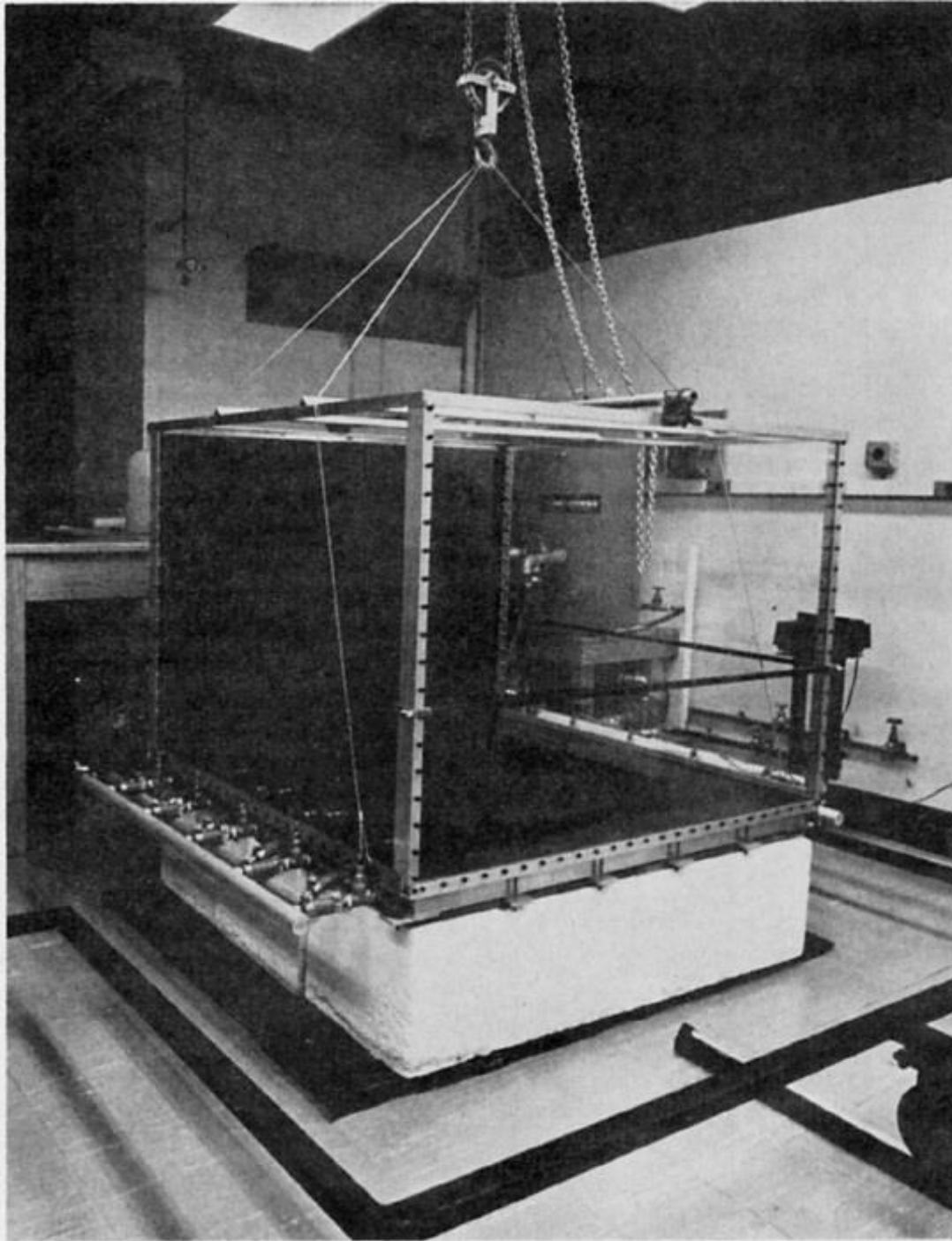


Figura 09: Fotografia do tanque de convecção.

A importância de se utilizar um experimento de laboratório para validar o modelo está no fato de que o experimento de tanque, esse experimento foi realizado em situações de convecção livre, bem controlada. Em um experimento de campo, a turbulência convectiva pode ser mascarada pelo efeito da turbulência mista, gerada também por forçantes mecânicas.

Com a proposta de avaliar a influência das plumas térmicas - representada pelo termo adicional da equação, na concentração de poluentes, para uma camada dominada por forte convecção - é de grande importância que se tenha controle sobre o experimento.

Assim, realizados os experimentos, foi possível comparar os resultados obtidos pelo modelo e pelas concentrações do mesmo, que foram realizadas próximas à superfície do solo.

A concentração de contaminantes, no nível do solo, exibidas na tabela 1 se referem ao experimento de Tanque de Willis e Deardorff (1978). Nessa tabela X corresponde à distância adimensional onde foi medida a concentração de poluentes e C. Exp. corresponde à concentração do experimento.

X	C. Exp.
0,1	0
0,2	0,5
0,3	1,5
0,4	2,6
0,5	2,7
0,6	2,7
0,7	2,5
0,8	2
1	1,4
1,5	0,8

Tabela02: Valores de concentração de contaminante no nível do solo. Fonte: Misra (1982)

Os parâmetros de entrada no modelo, utilizados acerca da altura da fonte, altura da camada convectiva, velocidade do vento média e emissão da fonte, estão listados na tabela 2.

Parâmetros	Valores
Q	10 g/s
Hs	300 m
Zi	1150 m
U	2,6 m/s

Tabela 03: Valores de entrada do modelo. Fonte: Lamb (1978)

7 PARAMETRIZAÇÃO DA TURBULÊNCIA

A parametrização adequada, utilizada no modelo de dispersão, é uma decisão importante para um melhor entendimento da dispersão atmosférica. Ao parametrizar a turbulência atmosférica, devem-se relacionar os fenômenos naturais com os modelos matemáticos, na tentativa de descrever a física da turbulência.

Entretanto, algumas características dos escoamentos turbulentos são sempre tridimensionais, irregulares e randômicos, à medida que a velocidade varia com o tempo, randomicamente, em todas as posições. O escoamento, dentro de uma camada convectiva, apresenta uma série de vórtices (redemoinhos) de diversos tamanhos. Eles se distribuem segundo um espectro de frequência, no qual os vórtices maiores apresentam menor frequência e os menores têm maior frequência.

Quando os fluídos se deslocam, em vórtices, levam consigo suas propriedades e as transportam para outra região do escoamento. Sendo assim, o transporte de propriedades por vórtices turbulentos é análogo ao transporte difusivo molecular, porém em escala muito maior. Os modelos de turbulência são classificados como de primeira ordem e são desenvolvidos a partir desta analogia, utiliza-se o conceito de difusividade turbulenta. Já nos modelos de fechamento não-local, além da modelagem nos coeficientes de difusão, há a física da turbulência presente nos termos adicionais. Esses termos adicionais aparecem na equação e modelam os transportes assimétricos de dispersão de poluentes.

Já os escoamentos turbulentos são sempre dissipativos, e continuamente há conversão de energia cinética em energia interna, desta forma, a menos que a energia seja continuamente fornecida, há queda de turbulência. Portanto, é preciso considerar que as fontes de energia para turbulência na atmosfera são o cisalhamento do escoamento e, em certos casos, as forças de empuxo.

O cisalhamento é causado pela presença do solo que freia ou acelera o escoamento, devido às suas características de topografia e rugosidade. As forças de empuxo se originam nos desvios do perfil vertical da temperatura em relação ao perfil da estabilidade neutra.

É preciso considerar, ainda que, o cisalhamento do escoamento é sempre uma fonte positiva de energia para a turbulência, mas os efeitos de empuxo não são. Isso ocorre porque quando a condição atmosférica está instável - as forças de empuxo contribuem para aumentar a turbulência e, quando a condição atmosférica está estável - as forças de empuxo tendem a reduzir a turbulência.

7.1 Coeficientes de Difusão

A maneira como os parâmetros turbulentos são calculados e relacionados com a estrutura da CLC é de fundamental importância para a validação do modelo e, a confiabilidade no mesmo depende da maneira como os parâmetros turbulentos são calculados/representados e relacionado à estabilidade da CLP.

Assim, os coeficientes de difusão vertical propostos por Degrazia *et al.* (1997 e 2001), formulados a partir da teoria de difusão de Taylor (1921), combinados com o espectro de energia cinética turbulenta são importantes na descrição da estrutura turbulenta da CLC.

7.1.1 Coeficiente de difusão de Degrazia *et al.* (1997)

O primeiro coeficiente de difusão, usado, foi deduzido por Degrazia *et al.* (1997), da seguinte forma:

$$\frac{k_z(z)}{w_* z_i} = 0.22 \left(\frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left(1 - \frac{z}{z_i}\right)^{\frac{1}{3}} \left[1 - e^{\frac{-4z}{z_i}} - 0.0003e^{\frac{8z}{z_i}}\right] (L < 0) \quad (7.1.1)$$

Onde z_i é a altura da camada limite convectiva e w_* é a velocidade convectiva (m/s).

7.1.2 Coeficiente de difusão de Degrazia *et al.* (2001)

O coeficiente de difusão desenvolvido por Degrazia *et al.* (2001) é válido para grandes tempos de difusão e, foi estimado a partir da teoria estatística de Taylor e de propriedades espectrais:

$$k_z = \frac{0.55}{4} \frac{\sigma_w z}{(f_m^*)_w} \quad (7.1.2)$$

Onde a variância da velocidade vertical é dada por:

$$\sigma_w^2 = 1.06 c_w \frac{\psi^{2/3}}{(f_m^*)_w^{2/3}} \left(\frac{z}{z_i}\right)^{2/3} w_*^2 \quad (7.1.3)$$

Onde $c_w = 0.36$, w_* é a escala de velocidade convectiva, $(f_m^*)_w$ é a frequência adimensional do pico espectral vertical e ψ é a taxa de dissipação de energia dada por (Druilhet *et al.*, 1983):

$$\psi = 1.5 - 1.2 \left[\left(\frac{z}{h} \right)^{\frac{1}{3}} \right] \quad (7.1.4)$$

Além disso, a escala de tempo Lagrangeana vertical é dada pela expressão:

$$T_{Lw} = \frac{0.55}{4} \frac{1}{\sigma_w} \frac{z}{(f_m^*)_w} \quad (7.1.5)$$

A frequência adimensional, do pico espectral vertical, pode ser expressa por:

$$(f_m^*)_w = \frac{z}{(\lambda_m)_w} \quad (7.1.6)$$

Onde $(\lambda_m)_w$ é o comprimento de onda, associado ao máximo do espectro vertical, dado por:

$$(\lambda_m)_w = \begin{cases} \frac{z}{0.55 - 0.38 \left| \frac{z}{L} \right|} & 0 \leq z \leq |L| \end{cases}$$

$$(\lambda_m)_w = \{5.9z \quad |L| \leq z \leq 0.1z_i \quad (7.1.7)$$

$$(\lambda_m)_w = \left\{ 1.8z_i \left[1 - \exp\left(\frac{-4z}{z_i}\right) - 0.0003 \exp\left(\frac{-8z}{z_i}\right) \right] \quad 0.1z_i < z \right.$$

Onde L é o comprimento de Monin-Obukhov.

7.1.3 Coeficiente de difusão de Pleim (2007)

As limitações dos modelos coeficientes de difusão local, para representar as condições convectivas na camada limite planetária, são bem conhecidas pelos muitos pesquisadores da área.

Assim, a parametrização de Pleim (2007) foi obtida a partir da combinação de termos que consideram o caráter local e não-local, no fechamento da turbulência, na equação de difusão-advecção. A expressão para tal coeficiente de difusão vertical, considerando atmosfera sob condições instáveis $\left(\frac{z_s}{L} < 0\right)$ é definida:

$$k_z = k_z(z)(1 - f_{\text{conv}}) \quad (7.1.8)$$

Com:

$$k_z(z) = k \frac{u_*}{\phi\left(\frac{z_s}{L}\right)} z \left(1 - \frac{z}{h}\right)^2, \quad (7.1.9)$$

$$f_{\text{conv}} = \left[1 + \frac{k^{-\frac{2}{3}}}{0.1a} \left(-\frac{h}{L}\right)^{-\frac{1}{3}}\right]^{-1} \quad (7.1.10)$$

$$\phi = \left(1 - 16 \frac{z}{L}\right)^{-\frac{1}{2}} \quad (7.1.11)$$

Onde $k \cong 0,4$ é a constante de Von Kármán; $a = 7,2$; u_* é a velocidade de fricção (m/s), h é a altura da CLC (m); $z_s = \min(z, 0.1h)$; ef_{conv} é o parâmetro que controla o grau de comportamento local versus não-local.

7.2 Perfil do Vento

Para o cálculo da velocidade média do vento, seguindo a teoria de Similaridade de Monin-Obukhov, a parametrização do vento é a seguinte:

$$u = \frac{u_*}{k} \left[\ln \left(\frac{z}{z_0} \right) - \Psi_m \left(\frac{z_0}{L} \right) \right] \quad \text{se } z \leq z_b \quad (7.2.1)$$

Onde $z_b = \min[|L|, 0.1z_i]$, $k = 0.4$ é a constante de Von Karman, u_* é a velocidade de fricção, z_0 é o comprimento de rugosidade e Ψ_m é a função estabilidade dado por (Paulsen, 1975):

$$\Psi_m = 2 \ln \left[\frac{1+A}{2} \right] + \ln \left[\frac{1+A^2}{2} \right] - 2 \tan^{-1}(A) + \frac{\pi}{2} \quad (7.2.2)$$

Com A definido por:

$$A = \left(1 - 16 \frac{z}{L} \right)^{1/4} \quad (7.2.3)$$

8 RESULTADOS

Os resultados das simulações numéricas, do modelo - utilizando o perfil do vento e as parametrizações descritas no capítulo 7 - foram alcançados através de análises das concentrações máximas, obtidas pela solução próxima à superfície e ao topo da CLC, o que resultou no comportamento dos coeficientes de difusão. Essas concentrações foram analisadas e confrontadas com o experimento de tanque.

Este método de resolução resolve a equação de difusão-advectação, usando a transformada de Laplace e considerando a CLP como sistema de multicamadas que é discretizado em N subcamadas de $\Delta z = 5\text{m}$ cada. Permitindo, assim, utilizar valores contínuos de coeficientes de difusão e vento fisicamente mais reais.

Foram obtidos resultados para diferentes valores da Quadratura de Gauss ($K = 4$, $K = 8$ e $K = 16$) e há relatos na literatura que indicam resultados melhores, para $K = 8$ (Vilhena e Barichello, 1991; e Vilhena e Streck, 1992).

Os resultados obtidos para concentração simulada pelo modelo euleriano, para uma distância de até 2500m da fonte, foram comparadas com as concentrações de contaminantes ao nível do solo, no experimento de Tanque de Willis e Deardorff (1978). Posteriormente, foi analisada a influência de diferentes valores de assimetria ($Sw=0$, $Sw=0.8$, $Sw=-0.8$), na concentração de contaminantes, para $z=5$ e 1100m (topo da CLC).

Foram realizadas simulações para três coeficientes de difusão diferentes (Degrazia *et al.* 1997, Degrazia *et al.* 2001 e Pleim 2007) e os resultados obtidos foram analisados almejando avaliar a influência de cada coeficiente, nas concentrações superficiais e próximo ao topo da CLC. Para as concentrações de poluentes próximas à superfície foi realizada a comparação com o experimento de tanque.

Para a obtenção dos resultados, foi utilizada a linguagem de programação FORTRAN90, à qual foi implementado o algoritmo para o cálculo da concentração de contaminantes.

8.1 Resultado das Simulações Coeficiente de Degrazia (1997)

Objetivando demonstrar o desempenho do modelo apresentado neste trabalho, os resultados obtidos nas simulações foram comparados com o experimento de Tanque de Willis e Deardorff (1978).

O coeficiente de difusão e a componente vertical do vento utilizado no modelo, assim como uma descrição sobre o experimento de Tanque, estão descrito no capítulo 6.

Na tabela 04, estão descritos os resultados das concentrações superficiais de contaminantes para o experimento de Tanque e das concentrações observados no modelo para diferentes valores de assimetria e distância da fonte.

C. Modelo K=4				
x (m)	C. Exp.	Sw=0	Sw=0,8	Sw=-0,8
150	0	0,02	0,000388	0,24
300	0,5	0,46	0,023	0,9
449	1,5	1,23	0,58	1,54
598	2,6	1,91	1,49	2,02
748	2,7	2,38	2,29	2,34
897	2,7	2,67	2,81	2,53
1047	2,5	2,83	3,1	2,64
1196	2	2,89	3,22	2,69
1495	1,4	2,87	3,19	2,68
2242	0,8	2,57	2,7	2,49

Tabela 04: Valores de concentrações superficiais para o experimento de tanque e para o modelo com K= 4 , com diferentes valores de assimetria.

Analisando as concentrações obtidas, para diferentes valores de assimetria, é possível observar na tabela 4 que os maiores valores de concentração foram obtidos para uma assimetria positiva (Sw=0,8) e, em todos os casos, nota-se um decréscimo nos valores de concentração após atingir o pico. Independentemente do valor de assimetria simulado, os picos de concentração aconteceram para uma distância da fonte de x= 1196m.

Portanto, é importante conhecer a distância da fonte onde ocorre a concentração máxima de contaminantes, pois dessa forma a análise do gráfico da concentração C ($C_y = U^*z_i/Q$), em função da posição ($x = Xw_*/Uz_i$), expõe-se que há diferentes assimetrias quando há proximidade com o nível do solo.

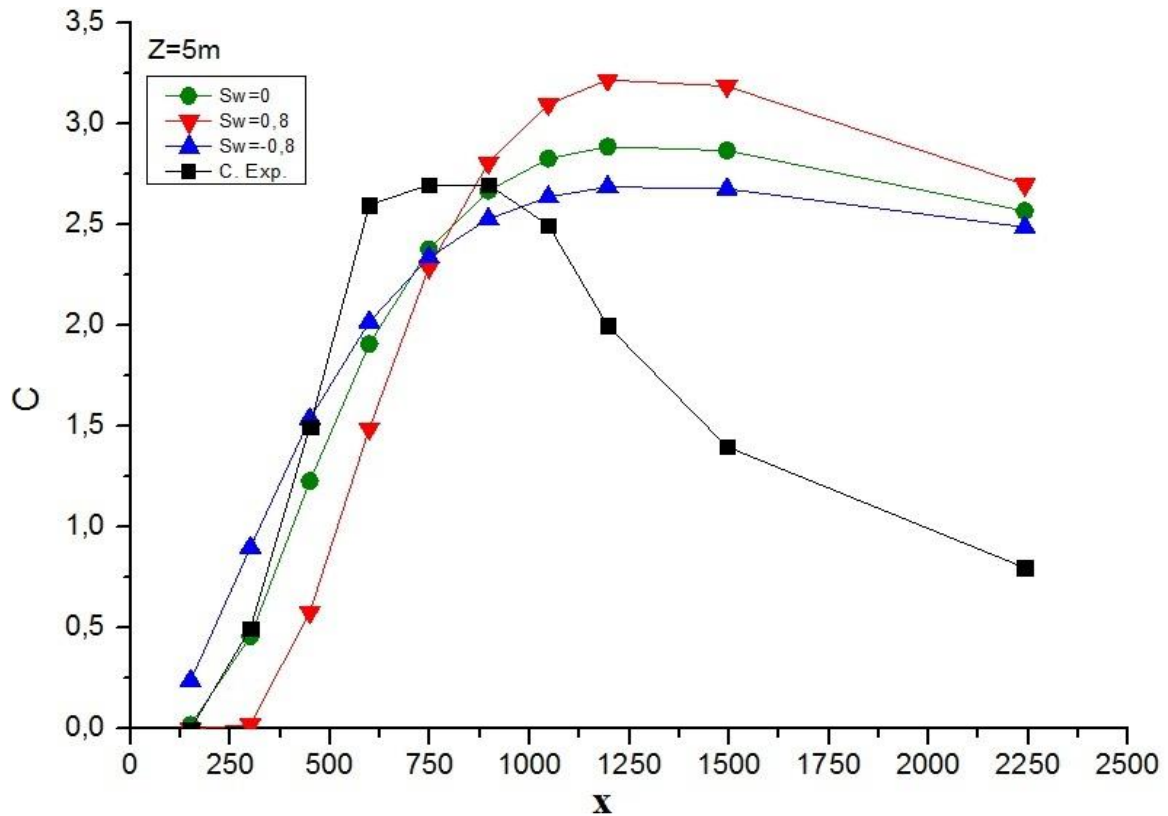


Gráfico 1: Gráfico da concentração superficial adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$) em função da distância ($x = Xw_*/Uz_i$) para diferentes valores de assimetria, comparados com experimento de Tanque.

Assim, o gráfico 1 possibilita a observação da influência da assimetria nas concentrações superficiais de poluentes, isso quando comparada com os valores do experimento de tanque em que se destacam as diferenças entre os resultados, com e sem o termo adicional na equação.

Entretanto, para as distâncias próximas da fonte em que $x=750$ m para o menor valor de assimetria, apresentou-se um maior valor de concentração e, após tal distância, notou-se uma assimetria positiva, pois há maiores valores de concentração de contaminantes.

Após $x=897$ as concentrações de contaminantes, no experimento de tanque, decrescem. Isso ocorre devido à atuação dos updraft (corrente ascendente de ar) que retiram do solo o contaminante que faz a concentração diminuir. Para a concentração em que $z=1100$ m,

próxima ao topo da CLC, com diferentes valores de assimetria, apresentam-se os resultados na tabela abaixo.

K=4			
x (m)	Sw=0	Sw=0,8	Sw=0,25
150	0,00001	0,48	0,002
300	0,01	0,166	0,04
449	0,07	0,315	0,14
598	0,19	0,469	0,28
748	0,34	0,616	0,44
897	0,51	0,751	0,59
1047	0,67	0,874	0,74
1196	0,81	0,984	0,87
1495	1,06	1,17	1,1
2242	1,45	1,48	1,462

Tabela 05: Valores de concentrações para o modelo com diferentes valores de assimetria com $z=1100$ m.

A seguir, é possível visualizar o gráfico da concentração em função da distância para diferentes assimetrias e $z=1100$ m.

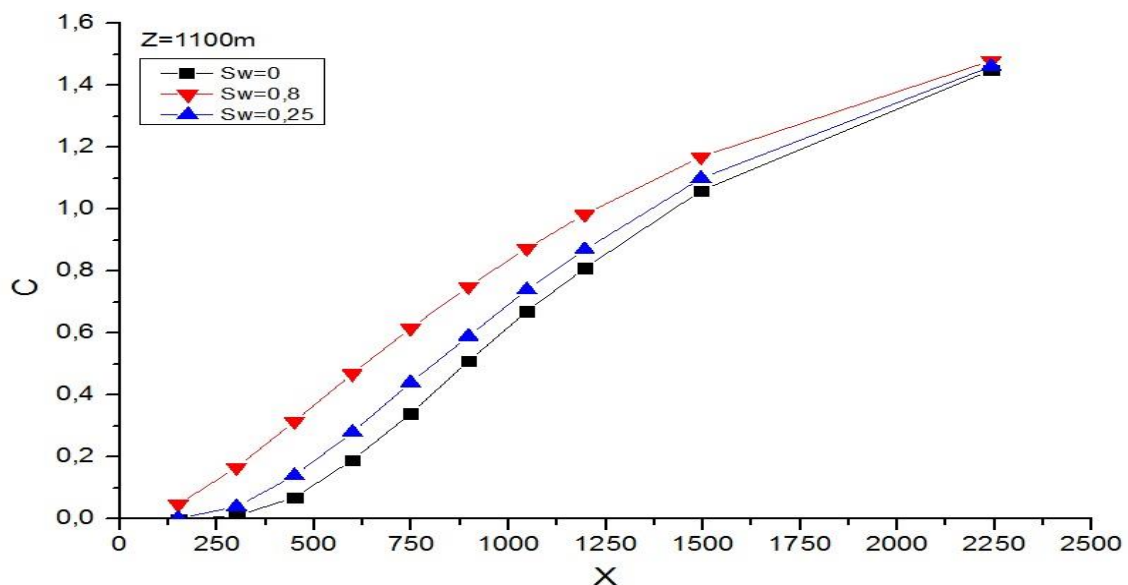


Gráfico 2: Gráfico da concentração adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$) em função da distância ($x = Xw_*/Uz_i$) para diferentes valores de assimetria em $z=1100$ m.

Observa-se, no gráfico 2 que, quando $z = 1100\text{m}$, há influência da assimetria na concentração de poluentes em alturas elevadas. Quanto maior o valor da assimetria, maior o valor da concentração de poluentes, podendo ocorrer a homogeneização de acordo com o distanciamento da fonte.

Ainda analisando os gráficos 1 e 2, nota-se que o efeito do transporte não-local para uma camada convectiva em que a assimetria influencia o pico de concentração de poluentes, quando comparado com a assimetria tanto ao nível do solo, como para regiões próximo ao topo da CLC.

Analizou-se, também, a concentração superficial com diferentes valores de assimetria utilizando $K = 8$ pontos da quadratura de Gauss, como é possível observar na tabela a seguir.

K= 8				
x (m)	C. Exp.	Sw= 0	Sw= 0,8	Sw= -0,8
150	0	0,02	0,000002	0,24
300	0,5	0,47	0,007	0,9
449	1,5	1,23	0,61	1,54
598	2,6	1,88	1,55	2,01
748	2,7	2,35	2,26	2,34
897	2,7	2,63	2,72	2,54
1047	2,5	2,8	2,99	2,66
1196	2	2,88	3,12	2,71
1495	1,4	2,91	3,14	2,73
2242	0,8	2,71	2,84	2,56

Tabela06: Valores de concentrações superficiais para o experimento de tanque e para o modelo com $K = 8$ em que se obteve diferentes valores de assimetria.

Analisando a tabela 6, acerca da influência de diferentes valores de assimetria na concentração superficial de poluentes para $K=8$, nota-se a influência da assimetria na concentração de poluentes. Isso porque os maiores valores de concentração de poluentes aconteceram para a assimetria positiva ($Sw=0,8$), uma decorrência da atuação de updraft na camada limite, pois ao reerguer o poluente ocorre a diminuição da concentração mais próxima ao solo.

Portanto, foi simulada a concentração superficial de poluentes para $x=4933\text{m}$, para diferentes pontos da quadratura de Gauss e para diferentes valores de assimetria (tabela 7), utilizando o coeficiente de Degrazia *et al.*(1997). A seguir, a tabela apresenta as descrições das concentrações superficiais em função da distância para diferentes valores da quadratura de Gauss.

Sw= 0			Sw= 0,8		Sw= -0,8	
x (m)	K= 4	K= 8	K= 4	K= 8	K= 4	K= 8
150	0,021	0,02	0,0004	0,000003	0,246	0,246
300	0,464	0,47	0,023	0,01	0,903	0,902
449	1,23	1,23	0,583	0,617	1,543	1,54
598	1,908	1,889	1,499	1,553	2,022	2,018
748	2,384	2,351	2,293	2,262	2,342	2,341
897	2,674	2,639	2,815	2,726	2,537	2,542
1047	2,83	2,806	3,106	2,998	2,645	2,66
1196	2,895	2,889	3,228	3,127	2,693	2,719
1495	2,873	2,916	3,195	3,144	2,689	2,737
2242	2,579	2,716	2,703	2,84	2,495	2,568
2990	2,341	2,491	2,341	2,597	2,32	2,377
3737	2,211	2,321	2,163	2,43	2,218	2,236
4485	2,155	2,2	2,097	2,301	2,169	2,14
4933	2,142	2,144	2,087	2,236	2,156	2,1

Tabela 07: Valores de concentrações para K= 4 e 8 para diferentes valores de assimetria.

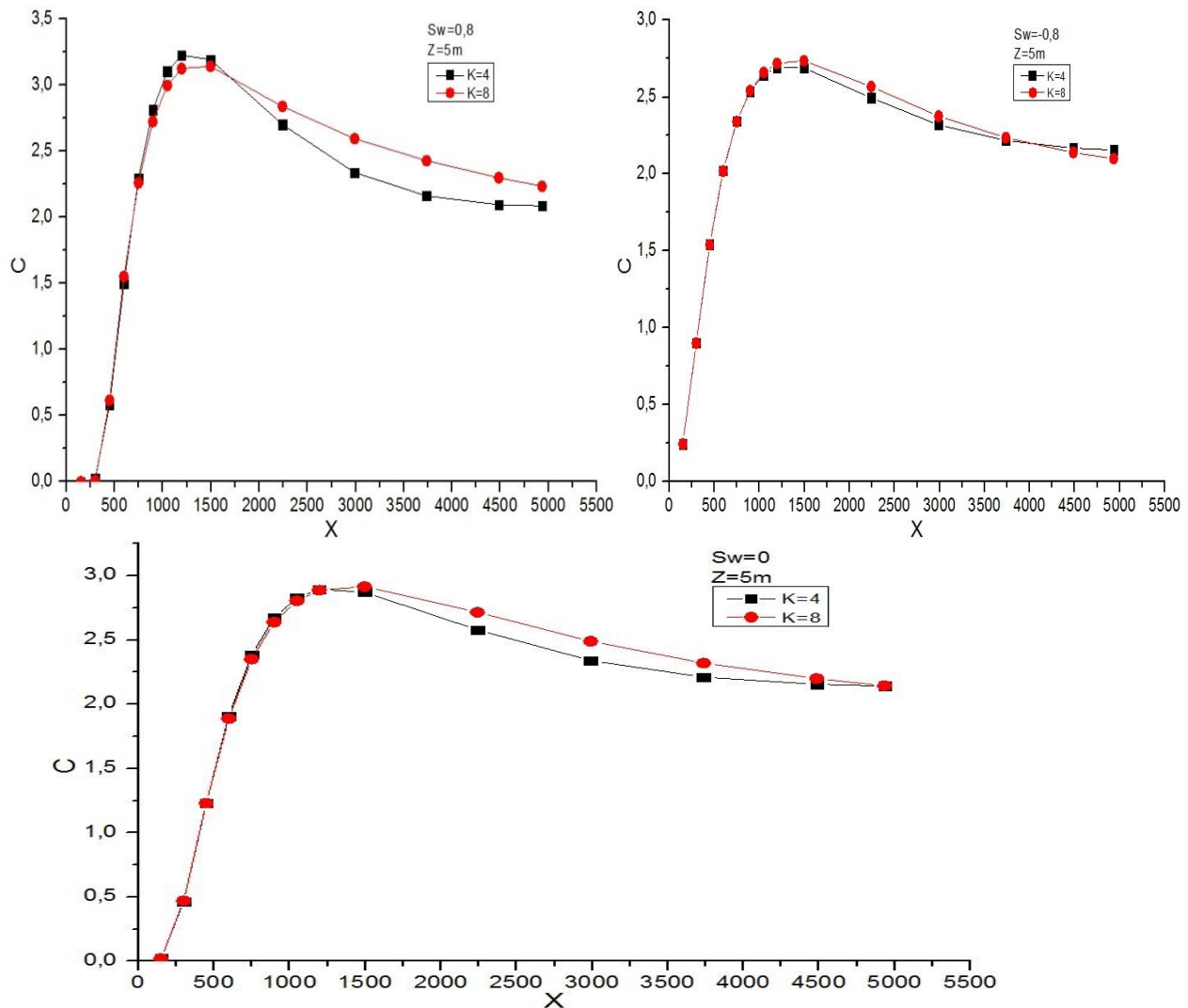


Gráfico 3: Gráficos da concentração superficial adimensional C ($C_y = U^* z_i / Q$) em função da posição adimensional ($x = Xw_*/Uz_i$) para diferentes pontos da quadratura de Gauss em $z = 5500m$.

Para analisar a concentração superficial, para diferentes valores da quadratura de Gauss mais próximos à fonte, os valores se mantêm próximos uns dos outros, mas após $K=8$ são apresentados maiores valores de concentração, com tendência à homogeneização, a partir de $x=4933$.

Para o $Sw=0.8$ observa-se que o pico de concentração de poluentes em $x=1196m$, para $K=4$. Após tal distância, há tendência para os maiores valores de concentração, para $K=8$.

Portanto, para a análise do comportamento da concentração de poluentes, em função da distância para diferentes valores da quadratura de Gauss variando a assimetria, notaram-se concentrações próximas à fonte com pouca variação, com variação de $K=4$ e 8 . Já para o caso

de $Sw = 0.8$, diferentemente de $Sw = 0$ e -0.8 , o pico de concentração ocorreu para $K = 4$ em $x = 1196m$.

As distâncias da fonte onde ocorrem os picos de concentração para $K = 4$ e 8 foram em $x = 1196$ e $1495m$, respectivamente, porque esses picos independem dos valores para a assimetria, mas quando foram realizados testes com $K = 16$, para diferentes valores de assimetria próximos à superfície do solo, os resultados oscilaram bastante.

8.2 Comparação entre os Coeficientes Degrazia *et al.* (1997 e 2001) e Pleim (2007)

Os resultados obtidos para os três coeficientes de difusão apresentados, descritos no decorrer do capítulo 7, foram comparados com as concentrações superficiais do experimento de tanque, tais comparações estão dispostas na tabela 08 e no gráfico 4.

Foram analisados os resultados obtidos nos coeficientes de difusão e para as concentrações próximas ao topo da CLC, foram realizadas simulações e os resultados estão dispostos na tabela 09 e no gráfico 6.

Sw= 0, Z= 5m, K= 8				
x (m)	Deg. 2001	Deg. 1997	Pleim 2007	C. Exp
150	0,36	0,02	0,0556	0
300	1,75	0,47	0,734	0,5
449	2,62	1,23	1,569	1,5
598	2,98	1,88	2,181	2,6
748	3,09	2,35	2,578	2,7
897	3,08	2,63	2,82	2,7
1047	3,02	2,8	2,963	2,5
1196	2,94	2,88	3,04	2
1495	2,77	2,91	3,092	1,4
2242	2,42	2,71	2,967	0,8

Tabela 08: Valores das concentrações superficiais para os coeficientes de difusão e experimento de tanque com $K=8$ e $Sw=0$.

Para as simulações com $Sw = 0$ em $z = 5m$ os valores de concentração de contaminantes, obtidos pelo coeficiente de Degrazia *et al.*(2001), superestimaram-se as concentrações observados no experimento de tanque. Entre os três coeficientes de difusão analisado, os resultados para Degrazia *et al.*(1997) apresentaram os menores valores de concentração de contaminantes. Já as concentrações adimensionais máximas (C) e suas respectivas distâncias (x), para cada coeficiente de difusão, estão citadas com os seguintes valores:

Segundo Degrazia *et al.*(1997), $x = 1495$ e $C = 2,91$; Segundo Degrazia *et al.*(2001), $x = 748$ e $C = 3,090$; Já para Pleim (2007), $x = 1495$ e $C = 3,092$.

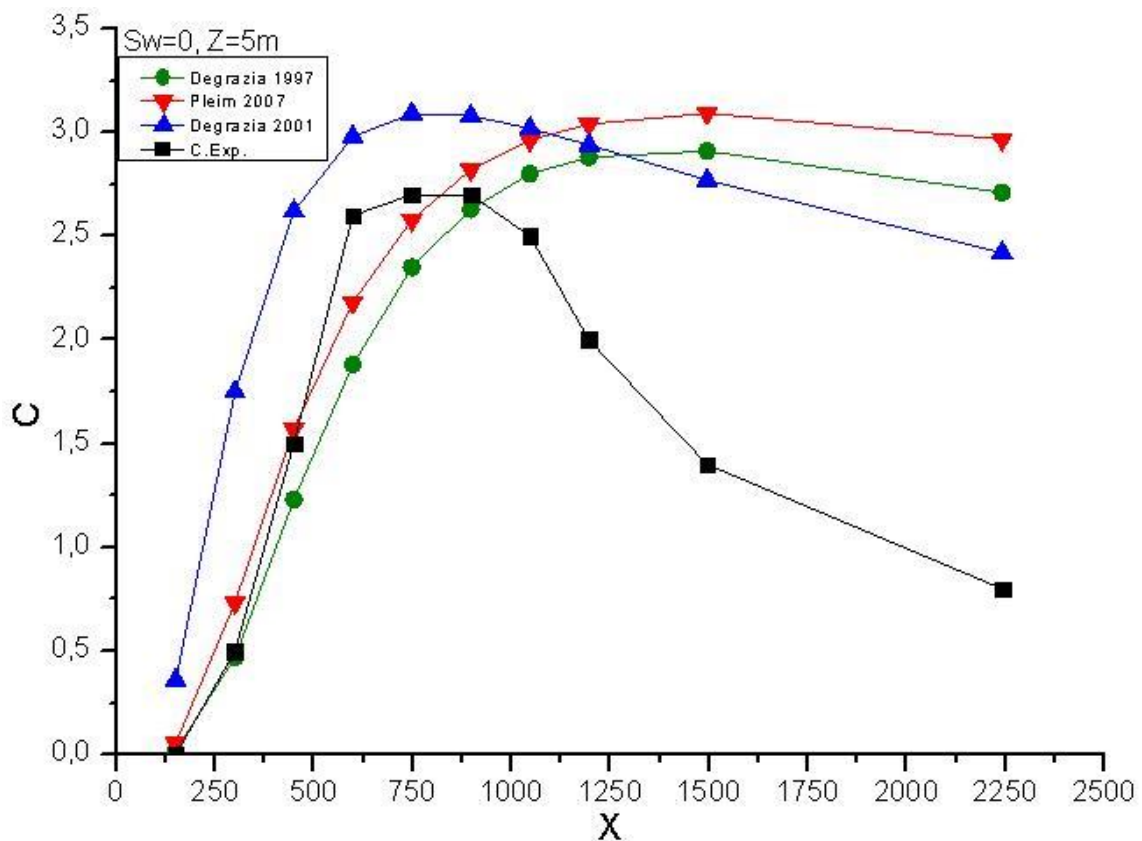


Gráfico 4: Gráfico da concentração superficial adimensional C ($C_y = U \cdot z_i / Q$), em função da distância ($x = Xw_*/Uz_i$), para os coeficientes de difusão em que $z = 5m$ e $Sw = 0$, comparados com experimento de Tanque.

No gráfico 4, estão dispostas informações sobre a concentração de contaminantes em função da distância, para os coeficientes de difusão, comparados com o experimento de tanque. Pode-se observar que há variação entre os coeficientes de difusão simulados.

A distância da fonte onde ocorre o risco de concentração de contaminante é representada, também, nas literaturas de Degrazia *et al.*(2001) e Pleim (2007), pela descrição de que há um

comportamento físico similar, mas os maiores valores de concentração foram obtidos por Pleim.

Assim, apresenta-se o gráfico 5 que é o gráfico de espalhamento (com dados acerca das concentrações observadas no experimento de tanque, em função das concentrações previstas pelo modelo) para diferentes os coeficientes de difusão.

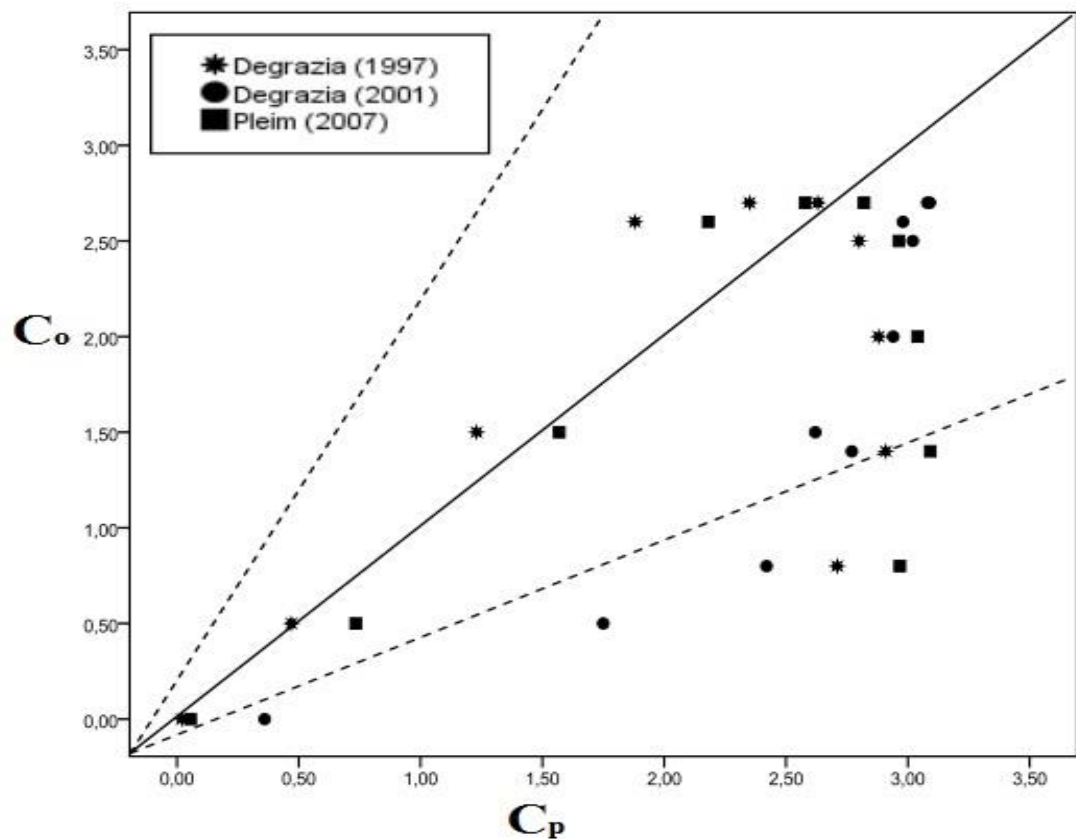


Gráfico 5: Gráfico de espalhamento dos dados observados (C_o) no experimento de tanque em comparação com os resultados de concentração do modelo (C_p).

Ao analisar o gráfico de espalhamento (o gráfico 5), é possível perceber que há uma reta de 45° com a linha vertical e a linha horizontal exerce função de visualização de concordância de resultados, o que é um ótimo comportamento esta representado pela linha central. Além da linha central, pode-se observar as linhas tracejadas nas quais a maioria dos pontos se encontram e indicam bons resultados.

O que permite compreender que as concentrações preditas - pelo modelo - superestimaram, em alguns pontos, os resultados obtidos no experimento de tanque, pois o modelo consegue representar bem os resultados, inclusive com dados acerca da distância na qual ocorre o pico de concentração.

Analisando, conjuntamente, a tabela 09 e o gráfico 6, é possível observar que as concentrações de contaminantes próximas ao topo da CLC ($z = 1100\text{m}$) são preditas pelo modelo para os coeficientes de difusão e, também, foram simuladas até uma distância da fonte de $x = 4933\text{m}$.

Sw= 0, z= 1100m			
x (m)	Deg. 2001	Deg. 1997	Pleim 2007
150	0,00035	0,00002	0
300	0,03794	0,00988	0
449	0,1729	0,07256	0
598	0,36525	0,194	0,001
748	0,56871	0,349	0,003
897	0,75692	0,511	0,011
1047	0,9243	0,668	0,027
1196	1,06791	0,812	0,051
1495	1,29716	1,056	0,121
2242	1,64385	1,452	0,376
2990	1,81856	1,669	0,646
3737	1,9098	1,797	0,882
4485	1,95724	1,876	1,079
4933	1,9734	1,908	1,179

Tabela 09: Valores de concentrações em função da distância para diferentes coeficientes de difusão em $Sw=0$ e $z = 1100\text{m}$.

Nos resultados obtidos para as simulações próximas ao topo da CLC, notou-se que o coeficiente de Degrazia *et al.*(2001) apresentou os maiores valores de concentração de contaminantes. Analisando, ainda, os resultados para Pleim (2007) foi possível observar que a concentração se manteve próxima a zero, para as distâncias da fonte em que $x = 1000\text{m}$.

Ao passo que a distância da fonte aumenta, há uma tendência à obtenção de um perfil homogêneo de concentração, para os coeficientes de Degrazia *et al.*(1997 e 2001), como se pode observar no gráfico 6.

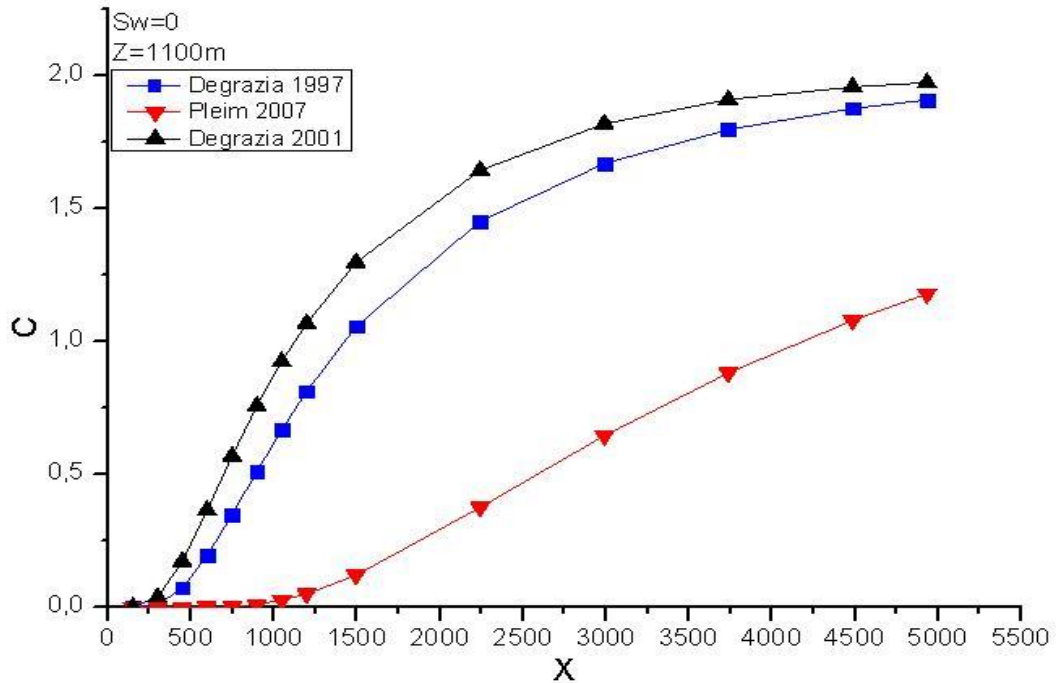


Gráfico 6: Gráfico da concentração adimensional C ($C_y = U^*z_i/Q$), em função da distância da fonte ($x = Xw_*/Uz_i$) para $z= 1100\text{m}$ e $x= 5500\text{m}$.

9 CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentado uma solução semi-analítica para equação difusão-advecção, considerando o fechamento não-local da turbulência, essa equação foi resolvida pelo método de Transformada de Laplace considerando a CLC como um sistema de multicamadas. A transformada inversa da solução foi obtida, numericamente, pelo esquema da quadratura de Gauss. Assim, considerar a CLC como um sistema de multicamadas permitiu que os parâmetros que envolvem a turbulência assumissem valor médio constante, em cada subcamada.

Considerando o fechamento não-local da turbulência, surgir um termo adicional na equação que contém informações sobre a assimetria, a escala de tempo Langrangeana e a escala da velocidade convectiva, podendo considerara física da dispersão de poluentes na CLC de maneira mais ampla e complexa. Entretanto, o fato do acréscimo de um termo adicional na equação não gerou esforço computacional adicional.

A avaliação de desempenho do modelo nas concentrações superficiais de poluentes, obtidas pelo modelo, foi comparada com as concentrações do experimento de Tanque. Observou-se que os resultados acerca da assimetria influenciaram na concentração de poluentes próxima ao solo e no topo da CLC. Além disso, quando há assimetria com valores negativos há ocorrência de updrafts, vórtices ascendentes e, os maiores valores de concentrações foram observados mais próximos da fonte de emissão.

Assim, foram analisadas também a concentração para diferentes valores da quadratura de Gauss e foram verificados maiores valores de concentração de poluentes superficial obtida para $K=8$, com exceção em $Sw=0,8$ e pico de concentração ocorreu em $x=1196m$, com o valor de $C=2,298$. Já para os valores de assimetria analisados (assimetria positiva, negativa e neutra), a concentração de poluentes tende a se homogeneizar com a distância da fonte.

Uma das maneiras utilizadas para análise dos resultados, para os diferentes coeficientes de difusão, foi o gráfico da concentração adimensional - em função da distância da fonte (Figura 13), o que possibilitou concluir que para a concentração superficial o coeficiente de Degrazia *et. al.*(2001) representou bem a distância da fonte ($x=748m$). Nesse, ocorre o pico de concentração, quando comparado com o experimento de tanque, o que é um fato importante a

ser considerado no controle da qualidade do ar, pois as concentrações máximas para os coeficientes de Degrazia *et al.* (1997) e Pleim (2007) ocorrem em $x = 1495\text{m}$.

No gráfico 5, que é o gráfico de espalhamento, estão descritas as concentrações preditas pelo modelo, em relação às concentrações observadas no tanque, os resultados apresentados foram bons. Entretanto, após atingir o pico de concentração de contaminantes, o experimento de tanque apresentou um decréscimo acentuado, tanto nos valores de concentração quanto nos coeficientes de difusão.

Em uma análise geral dos resultados obtidos, notou-se que o modelo mostrou um comportamento mais suavizado para a concentração adimensional quanto ao nível do solo, isso quando comparados com o experimento de tanque. Os resultados demonstram que, após atingir sua concentração máxima, o experimento de tanque apresenta um decréscimo acentuado nesses valores.

Isto é provocado pela atuação dos updrafts, que reerguem os contaminantes novamente para a parte central da CLC. Embora o modelo não simule esse decréscimo nas concentrações, ele representou bem a distância onde ocorreu o pico de concentração no tanque. Ainda é importante frisar que: o modelo de dispersão de poluentes, leva consigo as informações sobre o caráter não-local no fechamento da turbulência, demonstrando que a assimetria influencia o pico de concentração superficial e no topo da CLC.

10 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BARAD, M. L. **Project prairie grass, a field program in diffusion.** Geophys. Res. Pap., n. 59 1 and 2. Geophysics Research Directorate, Air Force Cambridge Research Center, 1958.
- BERLYAND, M. **Contemporary problems of atmospheric diffusion and pollution of the atmosphere.** translated version by NERC, USEPA, Raleigh, NC, USA, 1975.
- BRIGGS, G. A. **Plume rise predictions.** Lectures on Air Pollution and Environmental Impact Analyses, D.A. Haugen ed., American Meteorological Society Boston, MA, 1975.p. 59–111.
- BULIGON, L.;VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. **Uma solução semi-analítica da dispersão de poluentes com a equação do telégrafo e fluxo contragradiente.** Revista Brasileira de Meteorologia, v. 21, n.1, p. 77-85, 2006.
- CARVALHO, J. **Um estudo numérico da dispersão de poluentes na camada limite convectiva.** Dissertação (mestrado em meteorologia), Universidade de São Paulo, São Paulo, 1996.
- CHRYSIKOPOULOS, C. V.; HILDEMAN, L. M.; ROBERTS, P. V. **A three-dimensional atmospheric dispersion-deposition model for emissions from a ground-level area source.** Atmos. Environ. 26A, 1992. p. 747–757.
- COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. **Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na camada limite convectiva.** XIII Congresso Brasileiro de Meteorologia – CBMET, 2004.
- COSTA, C. P.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; CARVALHO, J. **Solução da equação de difusão-advecção com o termo de contragradiente no fechamento da turbulência para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera.** Revista Ciência & Natura, 2003. p.111–114.
- COSTA, C. P. **Influência de efeitos não-locais na dispersão de poluentes na Camada Limite Planetária.** Dissertação Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2004.
- DEARDORFF, J. W. **Convective velocity and temperature scales for the unstable planetary boundary layer and for raleigh convection.**J. Atmos. Society 27,1970. p. 1211–1213.
- DEARDORFF, J. W. **Theoretical expression for the counter-gradient vertical heat flux.** J. Geophys. Res. 77, 1972. p. 5900-5904.
- DEGRAZIA, G. A.; VELHO, H. F. C.; CARVALHO, J. C. **Nonlocal exchange coefficients for the convective boundary layer derived from spectral properties.** Contributions to Atmosph. Phys, 1997. p. 57–64.

DEGRAZIA, G. A.; MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T. **Derivation of an eddy diffusivity depending on source distance for vertically inhomogeneous turbulence in a convective boundary layer.** American Meteorological Society, 2001. p. 1233–1240.

DEMUTH, C. A. **Contribution to the analytical steady solution of the diffusion equation for line sources.** 12 ed. Atmos. Environ. 1978. p. 1255–1258.

FICK, A., **Phil. Mag.** (1855), 10 30.

FICK, A., **Annel De Poggendorff. Physik.** (1855), 94, 59.

GIFFORD, F. A. **Atmospheric dispersion models for environmental pollution applications.** Lectures on air pollution and environmental impact analysis DA Haugen, Ed. Amer. Meteor. Soc.: Boston, 1975. p. 35–58.

GRYNING, S. E.; LYCK, E. **Atmospheric dispersion from elevated source in an urban area: comparison between tracer experiments and model calculations.** 23 ed. Journal of Climate Applied Meteorology, 1984. p. 651–654

GUERRERO, J. S. P., PIMENTEL, L. C. G., SKAGGS, T. H. **Analytical solution for the advection-dispersion transport equation in layered media.** International Journal of Heat and Mass Transfer, 2013.

HAY, J. S.; PASQUILL, F. **Diffusion from a continuous source in relation to the spectrum and scale of turbulence.** 6 ed. Advances in Geophysics, 1959. p. 345–365.

MISRA, P. K. **Dispersión of non-buoyant particles inside a convective boundary layer.** Atmos: Environment. V16, 1982. p. 239–243.

KOCK, W. **A solution of the two-dimensional atmospheric diffusion equation with height-dependent diffusion coefficient including ground level absorption.** 23 ed. Atmos: Environ, 1989. p. 1729–1732.

LAMB, R. G. **A numerical simulation of dispersion from a elevated point source in the convective planetary boundary layer.** 12 ed. Atmos: Environ, 1978. p. 1297–1304.

LAMB, R. G. **Diffusion in the convective boundary layer.** IN: Atmospheric Turbulence and air Pollution Modelling, F. T. M., NIEUWSTADT; H. VAN DOP, Eds. Reidel, 1982. p. 159–229.

MONIN, A. S.; YAGLOM, A. M., **Statistical fluid mechanics.** Mit Press: Cambridge, 1971.

MONIN, A. S.; OBUKHOV, A. M. **Basic laws of turbulent mixing in the atmosphere near the ground.** Tr. Akad. Nauk, SSSR, Geofiz. Inst. 24, 1954. p. 1963–1987.

MOURA, A.; VILHENA, M.; DEGRAZIA, G. **Solução analítica para a dispersão vertical turbulenta em uma camada limite estável.** Proceedings of COBEM, 1995.

MOREIRA, D. M.; DEGRAZIA, G. A.; VILHENA, M.T.; **Dispersion from low sources in a convective boundary layer: an analytical model.** Il Nuovo Cimento 22C (5), 1999. p. 685-691.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; CARVALHO, J. C.; DEGRAZIA, G.A. **Analytical solution of the advection e diffusion equation with nonlocal closure of the turbulent diffusion.** Environmental Modelling & Software, 2004. p. 20.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BUSKE, D.; COTTA, R.M. **Near source atmospheric pollutant dispersing using the new GILTT method.** Atm. Environ, Vol.31, 2005a. p. 6289-6249.

MOREIRA, D. M.; CARVALHO, J. C.; TIRABASSI, T. **Plume dispersion simulation on low Wind conditions in stable and convective boundary layers.** Atm. Environ, vol. 39(20), 2005b. p. 3643-3650.

MOREIRA, D. M.; FERREIRA NETO, P. V.; CARVALHO, J. C. **Analytical solution of the Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation.** Environmental Modelling and Software, vol. 20, 2005c. p. 1159-1165.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; TIRABASSI, T.; BUSKE, D. **The GILTT solution of the advection-diffusion equation for an inhomogeneous and nonstationary PBL.** Atm. Environ., Vol.40, 2006. p. 3186-3194.

MOREIRA, D. M.; VILHENA, M. T.; CARVALHO, J. **Solução da equação de difusão-advecção com o termo de contragradiente no fechamento da turbulência para o estudo da dispersão de poluentes na atmosfera.** Ciência e Natura, 2003. p. 111–114.

NIEUWSTADT, F. T. M. **The turbulent structure of the stable nocturnal boundary layer.** J. Atmos. Society 41, 1984. p. 2202–2216.

NIEUWSTADT, F. T. M.; VAN ULDEN, A. P. **A numerical study on the vertical dispersion of passive contaminants from a continuous source in the atmospheric surface layer.** Atmos. Environ. 12, 1978. p. 2119–2124.

PASQUILL, F. **The estimation of the dispersion of windborne material.** Meteor. Mag. 90, 1961. p. 33–37.

PASQUILL, F. **Atmospheric Diffusion.** 2 ed. John Wiley & Sons: New York, 1974.

PLEIM, J. E., CHANG, J.; **A non-local closure model for vertical mixing in the convective boundary layer.** Atmospheric Enviromment, Vol. 26, 1992 p. 965-981.

PLEIM, J. E.; **A combined local and nonlocal closure model for the atmospheric boundary layer. Part II: Application and evaluation in a mesoscale meteorological model.** J. Appl. Meteor. Climatol., 46, 2007, p 1396-1409.

ROBERTS, O. F. T. **The teorical scattering of smoke in a turbulent atmosphere.** Proc. Roy. Soc. 104, 1923. p. 640–648.

ROUNDS, W. **Solutions of the two-dimensional diffusion equation.** Trans. Am. Geophys. Union 36, 1955. p. 395–405.

SCRIVEN, R. A.; FISHER, B. A. **The long range transport of airborne material and its removal by deposition and washout-ii.the effect of turbulent diffusion.** 9 ed. Atmos: Environ, 1975. p. 59–65.

SMITH, F. **The diffusion of smoke from a continuous elevated point source into a turbulent atmosphere.** 2 ed. J. Fluid Mech, 1957. p. 49–76.

SORBJAN, Z. **Structure of the atmospheric boundary layer.** Prentice Hall, New Jersey, 1989. p. 317.

STEVENS, B., **Quasi-steady analysis of a PBL model with an eddy-diffusivity profile and nonlocal fluxes.** Mon. Wea. Rev. 128, 2000. p. 824–836.

STROUD, A. H.; SECREST, D. **Gaussian Quadrature Formulas.** Prentice Hall, Inc., Englewood Cliffs, N. J., 1966.

TAYLOR, G. I. **Diffusion by continuos movements.** Proceedings London Mathematical Society 20, Series 2, 1921. p.196–211.

VANDOP, H.; VERVER, G. **Countergradient transport revisited.** Journal of the Atmospheric Sciences, vol. 58, 2001. p. 2240–2247.

VAN ULDEN, A. P. **Simple estimates for vertical diffusion from sources near ground.** 12 ed. Atmos: Environ, 1978. p. 2125–2129.

VILHENA, M. T.; BARICHELLO, L. B. **A new analytical approach to solve the neutron transport equation.** Kerntechnik 56, 5, 1991. p. 334–336.

VILHENA, M. T.;STRECK, E. E. **An approximate analytical solution of the one-group neutron transport equation.** Kerntechnik 57, 3, 1992. p. 196–198.

VILHENA, M. T.; RIZZA, U.; DEGRAZIA, G. A.; MANGIA, C.; MOREIRA, D. M.; TIRABASSI, T. **An analytical air pollution model: development and evalution.** Contr. Atmos, Phys71, 3, 1998. p. 315–320.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. **A laboratory model of the unstable planetary boundary layer.**J. Atmos: Society, 3, 1974. p. 1297– 1307.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. **A laboratory model of diffusion into the convective planetary layer.** Quart. J. R. Met. Society, 102, 1976. p. 427–445.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. **Alaboratory study of dispersion from elevated source within a modeled convective planetary boundary layer.**12 ed. Atmos: Environ, 1978. p. 1305–1311.

WILLIS, G. E.; DEARDORFF, J. W. **Laboratory study of dispersion from a source in the middle of the convectively mixed layer.** 15 ed. Atmos: Environ, 1981. p. 109–117.

WYNGAARD, J.; WEIL, J. **Transport asymmetry in skewed turbulence.** Phys. Fluids, vol. A3, 1991. p. 155–162.

YEH, G.; HUANG, C. **Three-dimensional air pollutant modelling in the lower atmosphere.** 9 ed. Boun: Layer Meteor, 1975. p. 381–390.